

ÉVALUATION DU DANGER ÉCOTOXICOLOGIQUE ET PRIORISATION DES FRAGRANCES
SYNTHÉTIQUES PRÉSENTES DANS LES PRODUITS DE SOINS CORPORELS OU DANS LES
DÉTERGENTS

Par
Louis-Simon Bolduc

Essai présenté au Centre universitaire de formation en environnement et développement durable en vue de
l'obtention du grade de maître en environnement (M. Env.)

Sous la direction de madame Mélanie Desrosiers

MAÎTRISE EN ENVIRONNEMENT
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Novembre 2018

SOMMAIRE

Mots clés : Fragrances, évaluation des dangers écotoxicologiques, démarche de priorisation, outil de priorisation, indice PBT/vPvB.

L'objectif général de cet essai consiste à évaluer les dangers écotoxicologiques potentiels des fragrances et à réaliser un exercice de priorisation des besoins d'études complémentaires concernant, plus particulièrement, les fragrances synthétiques présentes dans les produits de soins corporels ou dans les détergents. L'évaluation des dangers écologiques se base sur une revue de littérature qui permet de documenter la présence et la persistance des fragrances dans l'environnement en plus de leur potentiel de bioaccumulation et de toxicité. De plus, l'exercice de priorisation se réalise à l'aide d'une démarche de priorisation en conception au ministère de l'Environnement et de Lutte contre les changements climatiques. Cette démarche utilise différents critères d'évaluation basés sur la persistance, la bioaccumulation et la toxicité potentielle des substances à l'étude.

Actuellement, un grand nombre de fragrances sont produites annuellement sans toutefois dresser un portrait complet de leurs effets potentiels sur l'environnement. Leur présence dans l'environnement provient principalement des effluents municipaux dans lesquels sont retrouvés plusieurs contaminants d'intérêt émergent, dont les fragrances. Vingt-deux fragrances ont ainsi été documentées et soumises à l'exercice de priorisation et à l'évaluation du danger écotoxicologique. L'étude des substances, dont leur odeur de type ambré et animal, démontre que peu de données expérimentales sont disponibles et que le recours à des données modélisées s'est avéré nécessaire. L'exercice de priorisation a d'ailleurs permis d'identifier, en appliquant un processus de précaution, onze substances avec un potentiel de danger plus important dans l'eau, c'est-à-dire, l'isocyclemonone E, l'ambre kétal, le galaxolide, le moscène, le musc xylène, le musc cétone, le musc tibétène, l'ambre spiroène, le musc ambrette et le romandolide. Dans les sédiments, trois substances avec un potentiel de danger important ont été identifiées, soit l'helvetolide, le romandolide et le galaxolide, alors que dans les sols, deux substances ont été identifiées, soit le galaxolide et le musc xylène. Le manque de données dans les sédiments joue d'ailleurs un rôle important dans le classement, puisque 17 substances sur 22 n'ont pu être classées.

Pour conclure, la revue de littérature et l'exercice de priorisation permettent d'affirmer que des études écotoxicologiques seraient pertinentes pour un grand nombre de ces fragrances principalement dans les sédiments. De plus, la présence de ces fragrances dans les effluents municipaux et dans des eaux de surface américaines, européennes et asiatiques démontre la pertinence de mettre en place des méthodes d'analyses et des suivis environnementaux au Québec afin de s'assurer de la présence ou non de ces substances dans les milieux aquatiques québécois.

REMERCIEMENTS

Je tiens d'abord à remercier sincèrement ma directrice, Mélanie Desrosiers, pour ses conseils, ses explications, ses relectures tout au long de mon parcours de rédaction. Son accompagnement et ses suggestions m'ont permis de bonifier et d'enrichir mon essai.

J'aimerais également remercier toute l'équipe du Centre d'expertises en analyse environnementale du Québec (CEAEQ) pour leur accueil et leur encouragement durant la rédaction de mon essai.

De plus, j'aimerais remercier mes parents, Yvon et Hélène, pour leur soutien et aussi leur encouragement durant toutes mes années universitaires.

TABLES DES MATIÈRES

INTRODUCTION.....	1
1. LES GÉNÉRALITÉS DES FRAGRANCES.....	3
1.1 Les fragrances dans l'histoire.....	3
1.2 L'usage des fragrances.....	4
1.3 Les caractéristiques générales des fragrances	5
1.4 La réglementation à travers le monde	5
1.4.1 Les États-Unis.....	6
1.4.2 L'Europe	6
1.4.3 Le Japon	7
1.4.4 Le Canada	7
2. MÉTHODOLOGIE	8
2.1 Catégorisation des substances	8
2.2 Méthodologie pour déterminer les dangers sur l'environnement des substances	10
3. PROPRIÉTÉS DES FRAGRANCES ET ÉVALUATION DU DANGER ENVIRONNEMENTAL....	16
3.1 Les fragrances de type ambré.....	16
3.1.1 L'isocyclemone E (CAS 54464-57-2).....	18
3.1.2 Le cédroxyde (CAS 13786-79-3).....	20
3.1.3 L'ambre spiolène (CAS 154171-76-3)	21
3.1.4 L'ambre ketal (CAS 57345-19-4)	22
3.1.5 Le timbérone (CAS 70788-30-6).....	23
3.2 Les fragrances de type animal.....	24
3.2.1 L'helvetolide (CAS 141773-73-1) et le romandolide (236391-76-7)	25
3.2.2 L'ambrinol (CAS 41199-19-3)	27
3.2.4 Le musc xylène (CAS 81-15-2)	31
3.2.5 Le musc ambrette (CAS 83-66-9).....	32

3.2.6 Le moscène (CAS 116-66-5)	33
3.2.7 Le musc tibétène (CAS 145-39-1)	35
3.2.8 Le galaxolide (CAS 1222-05-5).....	36
3.2.9 Le glycérylacétale de phénylacétaldéhyde (CAS 29895-73-6).....	39
3.2.10 L'indolétal (CAS 18096-62-3).....	40
3.2.11 Le cervolide (CAS 6707-60-4).....	41
3.2.12 Le zénolide (CAS 54982-83-1).....	42
3.2.13 L'ambrettolide (CAS 123-69-3).....	44
3.2.14 L'éthylène brassylate (CAS 105-95-3)	46
3.2.15 L'exaltolide (CAS 106-02-5)	47
3.2.16 Le globalide (CAS 34902-57-3).....	49
4. EXERCICE DE PRIORISATION	51
4.1 Présentation de la démarche de priorisation.....	51
4.2 Méthodologie de l'exercice de priorisation.....	52
5. RECOMMANDATIONS.....	65
5.1 Recommandations pour l'eau.....	65
5.2 Recommandations pour les sédiments	65
5.3 Recommandation pour le sol.....	66
5.4 Recommandations spécifiques	66
5.5 Recommandations concernant l'outil de priorisation.....	66
CONCLUSION	68
RÉFÉRENCES.....	70
ANNEXE 1- LISTE DES COMPOSÉS IDENTIFIÉS COMME NOTE DE BASE	83
ANNEXE 2- FRAGRANCES DE TYPE ANIMAL DONT LE GROUPEMENT FONCTIONNEL EST UNE CÉTONE.....	85
ANNEXE 3- DONNÉES PHYSICO-CHIMIQUES ET ENVIRONNEMENTALES POUR LES FRAGRANCES	88

LISTE DES FIGURES

Figure 4.1 Processus d'acquisition et de classement de l'information du CEAEQ.....	51
Figure 4.2 Classification PBT/vPvB proposée par Gramatica et al.	54

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1 Classes d'odeurs selon the Rosace of odors de Firmenich 1972.....	10
Tableau 2.2 Fragrances priorisées pour l'évaluation de danger environnemental	11
Tableau 2.3 Critères des organisations gouvernementales utilisés pour l'évaluation de danger des nouvelles substances	14
Tableau 3.1 Fragrances de type ambré.....	17
Tableau 3.2 Résumé des propriétés physico-chimiques des fragrances d'odeurs de type ambré	18
Tableau 3.3 Propriétés physico-chimiques des fragrances de type animal	25
Tableau 3.4 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel est un ester ou un alcool	256
Tableau 3.5 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel est un ion ammonium	29
Tableau 3.6 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel principal est un éther cyclique...	36
Tableau 3.7 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel principal est une lactone	413
Tableau 4.1 Critères utilisés pour l'évaluation des données	533
Tableau 4.2 Classification de données disponibles	53
Tableau 4.3 Comparaison de la classification entre les données expérimentales et modélisées	555
Tableau 4.4 Comparaison de la classification entre les données modélisées	590
Tableau 4.5 Classification PBT/vPvB des données disponibles pour les 22 fragrances dans l'eau.....	600
Tableau 4.6 Classification PBT/vPvB des données disponibles pour les 22 frgrances dans les sédiments	611
Tableau 4.7 Classification PBT/vPvB des données disponibles pour les 22 fragrances dans les sols	633

LISTE DES ACRONYMES, DES SYMBOLES ET DES SIGLES

CAS	<i>Chemical Abstract Service</i>
CE	Concentration d'effet
CEAEQ	Centre d'expertise en analyse environnementale du Québec
CIE	Contaminants d'intérêt émergent
CL	Concentration létale
CMEQ	Concentration minimale causant un effet observable
COV	Composé organique volatil
CSEO	Concentration sans effet observable
DBO	Demande biochimique en oxygène
DCO	Demande chimique en oxygène
ECC	Environnement et Changement climatique Canada
ECHA	Agence européenne des produits chimiques
FBA	Facteur de bioaccumulation
FBC	Facteur de bioconcentration
FDA	<i>Food and Drug Administration</i>
HHCB	4,6,6,7,8,8a-hexaméthyl-1,3,4,6,7,8-hexahydrocyclopentabenzopyran
IFF	<i>International flavors and fragrance inc.</i>
IFRA	Association internationale des fragrances
IS	Indice de substantivité
K _{oc}	Coefficient de partage carbone organique-eau
K _{oe}	Coefficient de partage octanol-eau
K _{sa}	Coefficient partage sol-air
LCPE	<i>Loi canadienne sur la protection de l'environnement</i>
LIS	Liste intérieure des substances

MDDELCC	Ministère du Développement durable, de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques
MDDEFP	Ministère du Développement durable, de l'Environnement, de la Faune et des Parcs
MELCC	Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques
NICNAS	<i>National Industrial chemicals notification and Assessment scheme</i>
OCDE	Organisation de Coopération et Développement Économique
RIFM	<i>The research institute for fragrances materials</i>
RQSA	Relation quantitative structure-activité
S. d.	Sans date
S. o.	Sans objet
SCHEER	<i>Scientific Committee on Health, Environment and Emerging risks</i>
US EPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>

LEXIQUE

Bioaccumulation	Capacité nette des phénomènes d'absorption, de distribution et d'élimination d'une substance par un organisme par l'ensemble des voies d'exposition tels l'eau et la nourriture. (Roger, 2010)
Bioamplification	Propriété d'un contaminant à s'accumuler et se transférer dans la chaîne alimentaire causant l'augmentation de la concentration de la substance dans les organismes successif de la chaîne. (Roger, 2010)
Bioconcentration	Capacité nette d'absorption, de distribution et d'élimination d'une substance par un organisme à la suite de son exposition dans son milieu. (Roger, 2010)
Fragrance	Composante organique d'un produit caractérisé par une forte odeur, généralement agréable pour le consommateur (Surburg et Panten, 2016)
Indice PBT/vPvB	Indice qui permet d'évaluer les propriétés environnementales dont les potentiels peuvent s'avérer difficiles à prédire selon des critères bases sur les informations relatives de persistance, bioaccumulation et toxicité. (Gramatica, Cassani et Sangion, 2015)
Modèles prédictifs	Modèles théoriques, mathématiques et informatisés qui prédisent de façon qualitative ou quantitative les propriétés physico-chimiques, biologiques et leur devenir dans l'environnement des substances à partir de leur structure. (Agence européenne des produits chimiques [ECHA], 2016b)
Outil de priorisation	Méthode pour déterminer un ordre d'actions ou de mesures à mettre en place pour un groupe de substances selon des critères définis. (Homem, José, Ratola, Santos et Alves, 2015)
Persistance	Propriété d'une substance à demeurer présente dans l'environnement. (Roger, 2010)
Substantivité	Paramètre qui mesure la propriété de longévité d'une substance ou d'un produit lorsqu'elle est appliquée sur la peau. (Zarzo, 2013)
Temps de demi-vie	Indicateur de la persistance d'une substance dans une espèce ou un milieu. (Roger, 2010)
Toxicité aiguë	Principe des méthodes utilisées pour déterminer les concentrations d'une substance sur une courte durée (24 h, 48h et 96h). (Roger, 2010)

Toxicité chronique

Principe des méthodes utilisées pour déterminer les concentrations sans effet sur les espèces exposées à une substance sur une longue période. (Roger, 2010)

INTRODUCTION

Depuis quelques années, les contaminants d'intérêt émergent (CIE) sont de plus en plus présents dans les enjeux environnementaux, étant donné leur présence dans plusieurs produits de la vie courante et leur détection dans l'environnement, rendue possible grâce à de nouvelles méthodes d'analyse. Le développement technologique et l'amélioration des outils industriels ont favorisé l'utilisation de ces substances, dont la présence pourrait causer des problèmes pour la santé humaine ou pour l'environnement (ministère du Développement durable, de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques [MDDELCC], 2017). Or, ce développement rapide et le commerce international font en sorte qu'il est parfois difficile de mettre en place une réglementation efficace pour ces nouveaux produits (Sauvajon, 2014). Parmi ces substances, prenons par exemple le Prozac, un antidépresseur qui peut affecter le cycle de reproduction d'oiseaux (*Sturnus vulgaris*) (Whitlock, Pereira, Shore, Lane et Arnold, 2018). Les retardateurs de flammes, les plastifiants, les produits cosmétiques et les produits ménagers sont d'autres exemples qui contiennent des contaminants d'intérêt émergent. L'exposition chronique à ces substances peut engendrer des effets à plus long terme sur la biodiversité et sur la perte de fonctions et de services écologiques qui inquiètent de plus en plus la communauté scientifique. (Gavrilescu, Demnerová, Aamand, Agathos et Fava, 2015, MDDELCC, 2017, Peng et al., 2018).

Actuellement, près de 70 000 produits chimiques sont utilisés de façon commerciale au Canada. Certains de ces produits sont d'ailleurs connus des instances gouvernementales et ont fait l'objet de bannissement comme les biphényles polychlorés, les polybromodiphényléthers ou encore certains composés perfluoroalkylés comme le sulfonate de perfluorooctane. Cependant, le gouvernement canadien possède peu d'informations sur les dangers potentiels d'autres contaminants plus émergents dans l'environnement, comme les fragrances que l'on retrouve dans les aliments, les cosmétiques et les détergents (MDDELCC, s.d.).

Depuis une cinquantaine d'années, l'industrialisation a permis aux industries de produire près de 2 000 nouvelles fragrances par année. Malheureusement, ces substances chimiques, principalement synthétiques, se retrouvent de plus en plus dans l'environnement, et ce, en raison de la forte demande des consommateurs et de leur utilisation régulière (Ortiz de García, Pinto Pinto, García Encina et Irusta Mata, 2013). Ainsi, selon Homem, José, Ratola, Santos et Alves et al. (2015), près de 77 % des fragrances présentes dans les produits de consommation se retrouveraient dans les égouts. Les propriétés physico-chimiques, les structures et les concentrations variées, souvent très faibles, de ces substances rendent difficile la mise en place de traitements des eaux usées efficaces. Par conséquent, ces composés se retrouvent très probablement dans les effluents municipaux qui se déversent à leur tour dans les cours d'eau et dans les sols en raison de

l'épandage des boues (Ortiz de García et al., 2013). Il est donc nécessaire d'évaluer si ces substances sont susceptibles de présenter un danger pour l'environnement.

Ainsi, l'objectif général de cet essai consiste à évaluer les dangers écotoxicologiques associés aux fragrances synthétiques présentes dans les produits de soins corporels ou dans les détergents et de faire un exercice de priorisation afin d'évaluer les besoins d'études complémentaires. En prévision de répondre à cet objectif, différents éléments ont été analysés. Premièrement, les principaux groupes de fragrances ont été identifiés et des substances ont été sélectionnées dans certains de ces groupes. Deuxièmement, leur présence et leur persistance dans l'environnement ont été évaluées de même que leur toxicité et leur potentiel de bioaccumulation. Finalement, un exercice de classement des fragrances a été réalisé afin de prioriser les besoins futurs de recherche.

Pour produire cet essai, différentes publications scientifiques et gouvernementales ont été consultées. L'exercice de priorisation a été réalisé en respectant le principe de précaution avec les critères du Gouvernement du Québec, de l'*United States environment protection agency* (US EPA) et Homem et al. (Homem et al., 2015, ministère du Développement durable de l'Environnement de la Faune et des Parcs [MDDEFP], 2013, US environment protection agency [US EPA], 2012). Pour certifier la qualité des sources utilisées, des critères ont été élaborés afin d'assurer leur fiabilité. Ainsi, les références de l'auteur et la vulgarisation du texte ont été vérifiées.

Pour répondre à l'objectif principal, les résultats de cet essai sont organisés en cinq chapitres. Le premier chapitre présente l'histoire des fragrances, leur utilisation dans l'industrie et les réglementations de différentes organisations gouvernementales notamment du Canada et des États-Unis. Le second chapitre expose la méthodologie utilisée pour sélectionner, parmi les divers groupes de fragrances, les substances chimiques sur lesquelles ont porté cet essai. Il présente également des informations sur la méthodologie utilisée pour déterminer leurs dangers sur l'environnement. Dans le troisième chapitre, les propriétés physico-chimiques des fragrances et les informations relatives à leurs propriétés environnementales dans les différents milieux récepteurs, soit l'air, l'eau, le sol et les sédiments sont présentées. Le chapitre se sépare ainsi en fonction des fragrances dont le caractère odorant offre une odeur ambrée et une odeur animale. Le quatrième chapitre porte sur l'outil en développement au Centre d'expertise en analyse environnementale du Québec (CEAEQ) afin de permettre la priorisation des substances en fonction du milieu récepteur. Il expose les critères et la méthodologie utilisés pour réaliser la priorisation et les résultats obtenus. Certaines limites et incertitudes observées lors de la réalisation de l'exercice de priorisation y sont également présentées. Finalement, dans le cinquième chapitre des recommandations sont émises sur la priorisation des substances proposées par l'outil du CEAEQ et sur les données utilisées.

1. LES GÉNÉRALITÉS DES FRAGRANCES

De nos jours, les fragrances sont utilisées dans plusieurs produits de la vie quotidienne. Elles ont la capacité de rappeler certains souvenirs et même d'altérer l'humeur. Les sentiments que les fragrances produisent chez les personnes proviennent principalement de l'odorat. En effet, initialement, l'odorat favorisait la survie de l'espèce en lui permettant de détecter les dangers associés à des odeurs désagréables comme des gaz ou des matériaux en combustion. Au cours de son évolution, l'homme a développé sa mémoire et sa capacité de se souvenir des odeurs et, ainsi, de créer des liens avec des événements du passé (Mitsui, 1997). Ceci s'explique par le fait que l'odorat est relié au système limbique du cerveau qui est responsable de cette fonction (International Fragrance Association [IFRA], 2007). Les odeurs agréables influencent le jugement et les interactions sociales entre deux ou plusieurs individus (Cornwell et al., 2004, Wen, Moallem, Paller et Gottfried, 2007). Selon Leffingwell et al. (2012), l'utilisation de fragrances dans l'industrie moderne s'avère importante en raison des retombées économiques qu'elles engendrent. En effet, de 1999 à 2010 les bénéfices reliés aux fragrances et aux saveurs alimentaires sont passés de 12,9 à 22 billions de dollars (Leffingwell et al., 2012). Afin de mieux saisir l'importance des fragrances, un résumé de leur histoire dans l'évolution des sociétés modernes, une description de leurs principales caractéristiques et de leur utilisation ainsi que les différentes réglementations mises en place seront présentés dans ce chapitre.

1.1 Les fragrances dans l'histoire

L'usage des premières fragrances dans l'histoire remonte bien avant la révolution industrielle amorcée au 19^e siècle. Les populations du début de l'Antiquité exploitaient déjà les résines et les épices pour leurs propriétés préservatrices. Ces composantes naturelles animales ou végétales étaient connues pour leurs propriétés odorantes et gustatives. Aussi, selon les croyances de certaines sociétés, elles étaient également présentées comme offrandes (Surburg et Panten, 2016). Afin de produire les fragrances, des méthodes de combustion et de distillation simples étaient utilisées, par exemple l'extraction avec l'huile d'olive. Les Romains ont d'ailleurs été la première civilisation à introduire les fragrances dans leurs habitudes de vie en aromatisant leurs bains d'essences florales comme l'extrait de rose. Ils ont également été dans les premières sociétés à développer un marché économique à partir des fragrances (Mitsui, 1997, Surburg et Panten, 2016, Turcot, 2016, 9 février). Bien que les techniques se soient améliorées depuis, c'est au 9^e siècle que les Babyloniens ont proposé un procédé de distillation à la vapeur plus efficace pour l'extraction des substances odorantes. Ce procédé permettait de produire l'éthanol qui fût grandement utilisé par la suite pour extraire les parfums et les saveurs (Mitsui, 1997, Surburg et Panten, 2016). Malgré le développement systémique réalisé durant le 13^e siècle par les apothicaires, le procédé a très peu été modifié. Ces derniers introduisaient des composés aromatiques et odorants pour produire des remèdes à base d'huiles végétales et animales (Leffingwell et al., 2012). L'arrivée au Moyen-Âge des produits de l'Orient dans les commerces a également

permis d'acquérir une plus grande quantité d'épices et de plantes essentielles pour le travail des alchimistes (Bureau conseil parfums, tendances et inspirations, 2011).

La Renaissance apporte également des modifications dans cette industrie, car l'amélioration des techniques chimiques vient remplacer l'alchimie du Moyen-Âge. La découverte des passages maritimes vers les Amériques et l'Inde amènent de nouveaux produits jusque dans les centres européens permettant, ainsi, une plus grande diversité de fragrances (Bureau conseil parfums, tendances et inspirations, 2011). De cette façon, la fabrication industrielle des parfums et des articles parfumés de provenance naturelle est développée durant les 17^e et 18^e siècles (Mitsui, 1997). Le développement d'une meilleure hygiène personnelle dans ces sociétés a également eu un impact sur l'élaboration des fragrances, particulièrement pour les parfums. Étant devenus plus accessibles pour les différentes classes sociales, de nouveaux produits comme l'eau de Cologne ont été développés (Bureau conseil parfums, tendances et inspirations, 2011).

L'arrivée de l'industrialisation au tournant du 19^e siècle a augmenté la production des parfums et des saveurs alimentaires. La chimie moderne et l'évolution des techniques d'extraction ont permis l'utilisation de molécules organiques simples comme les fragrances en plus de produire, en 1845, la première huile aromatique synthétique. Malgré la confection de plusieurs autres substances, c'est la création complète de la vanilline et de la coumarine entre 1874 et 1878 par Haumann et Reimer qui a permis la mise en place des industries actuelles. Depuis, à l'aide de nouvelles méthodes d'analyses et d'extractions, le nombre de produits synthétiques ne cesse d'augmenter. (Surburg et Panten, 2016) En effet, en 2015, *The International fragrances association* (IFRA) a émis une liste de près de 4 000 substances utilisées dans cette industrie (IFRA, 2016).

1.2 L'usage des fragrances

Bien que l'utilisation des fragrances ne soit pas vitale, leur popularité explique leur présence dans plusieurs produits de la vie courante. D'emblée, elles se retrouvent dans le domaine de l'alimentation sous forme de saveurs naturelles ou artificielles qui permettent de rehausser le goût des aliments (Surburg et Panten, 2016). De plus, les fragrances se retrouvent dans les produits courants de la vie quotidienne réparties dans trois secteurs. Premièrement, elles sont utilisées dans la fabrication de produits de beauté, de cosmétiques et de parfums. Deuxièmement, on les retrouve dans les produits de soins personnels comme les shampooings et les colorants. Cette catégorie comprend également les produits pour le corps comme les gels nettoyants, les savons, les déodorants, la crème à raser ou à épiler. Finalement, les fragrances se retrouvent dans plusieurs produits ménagers comme les détergents pour textile, les détachants, les nettoyants toute surface, les chandelles ou les assainisseurs d'air. (Bridges, 2002, IFRA, 2007, Steinemann, 2016)

De façon tangible, ces molécules ajoutent des odeurs agréables dans les produits pour les rendre plus attrayants aux yeux des consommateurs (Lenochová et al., 2012). Parallèlement, ces composés permettent

de masquer les odeurs désagréables qui se retrouvent dans l'environnement ou celles dégagées naturellement par les individus. En effet, le style de vie et le code génétique déterminent les odeurs corporelles, cependant, la présence de maladie ou un changement d'alimentation peut modifier l'odeur. Le contrôle des personnes sur leur propre odeur engendre une prise de confiance et offre un effet apaisant pour les individus à proximité (Lenochová et al., 2012, Mitsui, 1997). Les fragrances agissent également sur les systèmes nerveux, endocrinien et immunitaire en plus de maintenir l'équilibre homéostatique du corps (Mitsui, 1997). Finalement, ces molécules peuvent agir comme bactéricides dans les articles ménagers et les produits de soins corporels (Kaplan, 2017).

1.3 Les caractéristiques générales des fragrances

Malgré l'utilisation variée des fragrances, celles-ci présentent certaines caractéristiques physiques qui les distinguent. Dans un premier temps, les fragrances se composent de molécules organiques volatiles qui possèdent une masse moléculaire inférieure à 300 unités atomiques et une pression de vapeur de moins de 2 mm de mercure (Salvito, Senna et Federle, 2002). Ces substances forment des structures chimiques variées linéaires et macrocycliques qui interagissent de façon similaire avec les récepteurs du cerveau. Un grand nombre de groupements fonctionnels peuvent se retrouver dans ces molécules, comme les cétones, l'aldéhyde, l'alcool, les esters ou les phényles. Cet ensemble de substances permet de répertorier différentes odeurs comme les odeurs florales, résineuses ou encore herbacées (Salvito et al., 2002, Surburg et Panten, 2016). De façon générale, la conception des produits de consommation contenant des fragrances nécessite plus qu'un ingrédient. Il n'est pas rare de retrouver dans la fabrication de certains de ces produits de 10 à 100 substances (Salvito et al., 2002).

1.4 La réglementation à travers le monde

Actuellement, il n'est pas nécessaire de produire une évaluation de danger ou de risque pour les fragrances. En raison de leur utilisation historique, elles sont généralement considérées comme sécuritaires. Des évaluations sont cependant réalisées de façon volontaire par l'industrie pour vérifier les effets de ces substances sur la santé humaine. Toutefois, ces études contiennent très peu d'informations concernant les effets environnementaux (Bridges, 2002, Surburg et Panten, 2016). Ces évaluations ont également permis le développement de deux organismes qui favorisent un système d'autorégulation par les industries, soit l'Institut de recherche pour les matériaux parfumant (IRMP) et l'IFRA. L'IRMP évalue et compile les données sur les composantes utilisées dans les fragrances. Jusqu'à présent, près de 6 000 substances sont classées, offrant ainsi, une expertise complète pour chaque molécule par un comité de scientifiques indépendants. Ce comité s'assure que les stratégies, les protocoles utilisés et les conclusions émises dans les recherches soient conformes aux standards en vigueur par l'IFRA. (Institut de recherche pour matériaux parfumant [IRMP], s.d.) L'IFRA promeut l'emploi sécuritaire des fragrances à travers le monde. Cette

association donne l'assurance des bons usages relatifs aux standards offerts et à la mise en place d'indicateurs de suivi. À l'aide de plusieurs associations regroupées dans près de 21 pays, dont le *Cosmetic Alliance* au Canada, l'IFRA favorise des interactions entre le gouvernement fédéral et l'industrie. Elle fournit également des informations qui permettent l'exportation des produits et la mise en place d'exigences légales associées à leur utilisation, notamment au Canada. (Cosmetics alliance Canada, s.d., IFRA, 2007)

Afin de conserver un certain contrôle sur les fragrances, certaines organisations gouvernementales ont mis en place des lois et des règlements.

1.4.1 Les États-Unis

Aux États-Unis, les fragrances sont réglementées par la *Food and Drug Administration* (FDA). Par définition, elles font partie de la classe des cosmétiques, qui selon la *Federal Food, Drug and Cosmetic Act* sont définis comme des produits de soins corporels qui servent à « nettoyer, embellir, promouvoir l'attraction et altérer l'apparence d'un individu ou d'un bien » (United States Food and drug administration [FDA], 2002). Aux États-Unis, les cosmétiques ne requièrent pas d'évaluation de danger avant leur mise en marché. Afin d'assurer une protection pour le public, tous les produits possèdent un libellé d'avertissement qui mentionne que l'article n'a pas fait l'objet de test. Pour la FDA, la distinction entre un médicament et un cosmétique peut parfois paraître complexe, puisque certains produits entrent dans une catégorie qui comprend autant des cosmétiques que des médicaments. En effet, les shampooings font partie de la catégorie des cosmétiques, mais un shampooing contre les pellicules est considéré comme un médicament. Toujours selon la FDA, le dentifrice et les déodorants peuvent également être définis comme un médicament et un cosmétique. Bien que les cosmétiques ne nécessitent pas d'évaluation, les médicaments et les drogues doivent être approuvés par le *New Drug Application* (Bridges, 2002, FDA, 2002).

L'US EPA s'intéresse aussi aux fragrances en raison des effets environnementaux que certains composés volatils (COV) peuvent produire dans l'air ambiant. En effet, l'US EPA demande aux entreprises de limiter l'utilisation des COV connus par l'entremise de nouvelles réglementations et de l'exigence d'informer sur la présence de fragrance dans les produits. Toutefois, la liste des ingrédients peut rester confidentielle afin de protéger les procédés industriels. (Bridges, 2002)

1.4.2 L'Europe

En Europe, les pays membres de la Commission européenne font intervenir des comités d'experts indépendants. En 2016, deux comités ont été mandatés pour émettre des opinions sur les études scientifiques produites sur les CIE. Ainsi, le *Scientific Committee on Health, Environment and Emerging Risks* (SCHEER) formule des opinions sur l'identification des dangers des contaminants. Il doit également fournir son avis sur les dangers reliés aux polluants dans les différentes matrices (eau, sol, air) (Commission européenne,

s.d.c). Pour sa part, le Comité scientifique de la sécurité du consommateur présente une évaluation des dangers associés aux produits consommables non alimentaires, c'est-à-dire les cosmétiques et les articles ménagers (Commission européenne, s.d.b). Une fois les avis et recommandations de ces comités réalisés, ceux-ci peuvent être utilisés par des organisations, comme l'Agence européenne des substances chimiques (ECHA), qui ont comme but d'effectuer des évaluations de danger ou de risque pour les différentes substances (Commission européenne, s.d.a).

1.4.3 Le Japon

Comparativement à d'autres pays d'Asie, le Japon a déréglementé l'industrie du cosmétique en abolissant l'obligation d'avoir une licence pour les compagnies. Le virage vers une approche occidentale fait en sorte que la *Loi des affaires pharmaceutiques japonaise* vient dicter l'usage et la vente des articles de soins corporels. Toutefois, certains produits utilisés depuis longtemps dans les marchés européens et américains se sont vus refuser l'entrée dans le marché nippon. C'est le cas des nitromuscs, un groupe de substances de la famille des muscs utilisés comme base en parfumerie et comme fixatif moléculaire qui sont connus comme dangereux pour la santé humaine. Le ministère de la Santé, du Travail et des Affaires sociales japonais présente ainsi une liste des composés prohibés ou restreints sur leur territoire (ministère de la Santé du Travail et des Affaires sociales, 2000).

1.4.4 Le Canada

Tout comme aux États-Unis, le Canada considère les fragrances comme des cosmétiques selon la *Loi sur les aliments et les drogues*. La loi canadienne insiste sur l'interdiction de vendre des articles cosmétiques s'ils sont néfastes pour la santé, s'ils sont produits dans des conditions non hygiéniques ou encore s'ils sont composés d'ingrédients non autorisés par les autorités canadiennes. Un *Règlement sur les cosmétiques* est également en vigueur dans lequel des balises pour la vente et la présence de cosmétiques sur le sol canadien doivent être fournies. Par exemple, afin de protéger la santé humaine, les preuves d'innocuité des cosmétiques doivent être présentées dans des délais dits raisonnables sous risque de perdre l'autorisation de vendre le produit. Tout comme son voisin du Sud, le Canada définit certains produits comme un médicament et un cosmétique. Selon le *Règlement sur les cosmétiques de 2004*, tous les ingrédients doivent être indiqués sur l'emballage des produits. Cependant, la présence de fragrances peut être présentée comme des parfums à la fin de la liste d'ingrédients. Si une compagnie ne mentionne pas le terme parfum, celle-ci doit énumérer l'ensemble des ingrédients sur l'étiquette. Le même libellé est utilisé pour les saveurs, le terme arôme est alors préféré dans l'identification du produit (Santé Canada, 2006). Tout comme au Japon, une liste de substances interdites au Canada est disponible. Cette liste est le résultat d'études menées sur les substances par Santé Canada et par Environnement et Changement climatique Canada afin d'assurer la protection des citoyens canadiens (Santé Canada, 2018).

2. MÉTHODOLOGIE

Afin d'effectuer une première évaluation des effets environnementaux potentiels des fragrances, une sélection de celles identifiées dans la liste des 4 000 substances de l'IFRA a été réalisée. Ce chapitre présente donc la méthodologie utilisée pour sélectionner ces substances, les catégoriser et rechercher des informations pour leur évaluation de danger.

2.1 Catégorisation des substances

La liste de l'IFRA présente les noms génériques et le numéro du *Chemical Abstract Service* (CAS) des fragrances naturelles et synthétiques utilisées dans l'industrie. Le grand nombre de composés de la liste rend néanmoins complexe la recherche exhaustive des effets des fragrances dans l'environnement. Le nombre de substances à évaluer a donc été réduit à l'aide du *Common Fragrance and Flavor Materials* qui présente près de 350 molécules produites en grande quantité et divisées en tenant compte de leur groupement fonctionnel selon le système Beilstein. Bien que ce genre de classement s'avère efficace, le nombre de composés identifiés reste imposant et ce classement contient peu de lien avec les propriétés olfactives des molécules. (Surburg et Panten, 2016)

Il a aussi été possible de réduire cette liste en utilisant les informations supplémentaires sur leur occurrence, leur usage et leur type d'odeur (Surburg et Panten, 2016). Afin de limiter le nombre de substances à évaluer, les composés synthétiques ont été priorisés dans cette étude de dangers par rapport aux substances naturelles. En effet, bien que peu d'informations sont disponibles sur le potentiel de dangerosité des substances naturelles, leur utilisation est limitée dans l'industrie, principalement en raison des procédés d'extraction existants, des coûts et des statuts protégés de certaines espèces, ce qui avantage l'usage des composés émergents synthétiques (Bureau conseil parfums, tendances et inspirations, 2000).

L'utilisation de ces composés dans les produits d'usage courant permet également de réduire le nombre de substances potentielles pour l'évaluation de danger. En effet, le critère d'utilisation a été évalué en fonction des secteurs d'activités, tels que l'alimentation, la parfumerie, les produits de soins corporels et les produits ménagers, d'utiliser ces substances. Les composés principalement employés en alimentation, comme le cis-héptale (CAS 6728-31-0) ou le γ -nonalactone (CAS 119-84-6) ont été exclus de la liste, ainsi que les molécules utilisées en parfumerie comme le dodécanale (CAS 112-54-9) et le 3-phénylpropanale (CAS 104-53-0). En effet, les modifications chimiques que peuvent subir les saveurs alimentaires, à la suite de leur passage dans l'appareil digestif, rendent leur présence dans les systèmes de traitement municipaux peu probable sous leur forme initiale (Lewinsohn et al., 2001). De plus, la grande volatilité des composantes utilisées dans les parfums restreint la possibilité de les retrouver dans les eaux usées, puisque celles-ci sont rapidement évaporées après leur application (Zarzo, 2013). Ainsi, les substances contenues dans les produits de soins corporels et les produits ménagers ont été privilégiées par rapport aux domaines de l'alimentation

et de la parfumerie. Pour faciliter la lecture de l'essai, ces deux domaines ont été jumelés, bien que ces produits soient de nature différente. De cette façon, le tri effectué parmi la liste initiale de molécules cible les détergents, les produits ménagers, les savons, les gels pour le corps, les shampooings et tout autre produit de soins corporels.

Le retrait des substances naturelles et de celles des domaines de l'alimentation et de la parfumerie a permis de réduire le nombre de molécules à environ 160. Afin de rester cohérent et d'offrir une évaluation objective de ces molécules, ces substances ont été catégorisées en fonction du type d'odeur qu'elles dégagent dans les produits de consommation. Il va sans dire que plusieurs méthodes de classification des odeurs existent, particulièrement pour les parfums. Bien que ces derniers aient été exclus, les odeurs associées aux molécules retrouvées dans les produits de soins corporels ressemblent aux autres domaines.

Différentes catégorisations ont été proposées à travers les siècles. Il est possible de remonter au 4^e siècle avant Jésus-Christ alors qu'Aristote a présenté l'une des premières méthodes qui associaient l'odeur à un état émotionnel de dégoût ou de plaisir. À partir du 18^e siècle, des catégorisations plus exhaustives sont apparues avec les travaux de Linnæus en 1752 et de Bain en 1855. En 1962, la Société technique des parfumeurs de France a suggéré une classification en huit catégories qui inclut les types d'odeurs majoritairement utilisés dans l'industrie. En 1995, l'équipe de Jaubert, Tapiero et Dore a proposé une classification qui comporte 42 genres d'odeurs. (Downthwaite, 2000) Cependant, pour faciliter le tri de la liste, la classification *The Rosace of Odors* de Firmenich a été utilisée. Cette catégorisation de 1972 permet de séparer les substances en 13 types d'odeurs présentés dans le tableau 2.1. Afin de favoriser la recherche, les molécules ont ensuite été divisées en fonction de leur indice de substantivité (IS), c'est-à-dire le temps que la fragrance prend pour s'évaporer à la suite de son application, présenté dans le *H & R Fragrance Guide*. (Zarzo, 2013) Le tableau 2.1 contient les données du *H & R Fragrance Guide* et la catégorie à laquelle les substances appartiennent.

Une fois les valeurs de substantivité identifiées, les odeurs ont été classées selon la classification de Roucher qui date de 1955 (Downthwaite, 2000). Cette méthode permet de regrouper les molécules en fonction de l'IS. Le lien entre l'IS et les classes d'odeurs a d'ailleurs été prouvé par Zarzo en démontrant l'importance de la substantivité avec les propriétés physico-chimiques des molécules (Zarzo, 2013). Ainsi, un composé avec une substantivité entre 0 et 14 est défini comme une senteur très volatile (note de tête), une valeur entre 15 et 65 correspond à une volatilité un peu moindre (note de cœur) et une valeur entre 65 et 100 est considérée comme la moins volatile (note de fond) (Downthwaite, 2000). En d'autres mots, une substance identifiée comme note de tête possède une substantivité de quelques heures, alors qu'un composé dit note de fond pourrait durer quelques jours après son application (Zarzo, 2013). Ainsi, les molécules qui appartiennent aux notes de fond ont été priorisées aux deux autres catégories en raison de leur temps de

contact avec la peau et leur potentiel plus élevé de transfert dans les eaux usées et, éventuellement, dans l'environnement.

Tableau 2.1 Classes d'odeurs selon the Rosace of odors de Firmenich 1972 (compilé d'après Surburg et Panten, 2016, p. 5 et Zarzo, 2013, p. 471)

Classe des odeurs	Description	Valeur IS	Catégorie d'odeur
Aldéhydrique	Odeur associée aux longues chaînes d'acide gras (Surburg et Panten, 2016).	0	Note de tête
Citronnée	Odeur associée aux agrumes (Surburg et Panten, 2016).	0	Note de tête
Herbacée	Odeur associée aux herbes comme la menthe (Surburg et Panten, 2016).	3	Note de tête
Verte	Odeur associée à des feuilles ou à du gazon fraîchement coupé (Surburg et Panten, 2016).	7	Note de tête
Fruitée	Odeur associée aux fruits (Surburg et Panten, 2016).	8	Note de tête
Épicée	Odeur associée aux substances utilisées comme épices (Surburg et Panten, 2016).	30	Note de cœur
Florale	Odeur associée aux fleurs (Surburg et Panten, 2016).	48	Note de cœur
Ligneuse	Odeur associée aux composés du bois (Surburg et Panten, 2016).	82	Note de fond
Poudreuse	Odeur associée à des composés minéraux (talc) (Frangrantica, 2017).	100	Note de fond
Balsamique	Odeur associée à des effets camphrés, résinés et fumés (Frangrantica, 2017).	100	Note de fond
Ambrée	Odeur associée à une odeur d'animaux marins (Frangrantica, 2017).	100	Note de fond
Animale	Odeur de provenance animale (muscs, civets et castrodium) (Surburg et Panten, 2016).	100	Note de fond
Terreuse	Odeur relative à un sol humide ou à de l'humus (Surburg et Panten, 2016).	100	Note de fond

En résumé, la classification des fragrances a été réalisée avec différentes méthodes qui ont permis de prioriser les molécules synthétiques qui comportent un indice de substantivité fort (note de fond) et qui sont utilisées dans les produits de soins corporels. Le tableau de l'annexe 1 présente les 33 composés possédant une note de fond ainsi que les types d'odeurs auxquels ils se rapportent.

2.2 Méthodologie pour déterminer les dangers sur l'environnement des substances

Les informations disponibles concernant les molécules étudiées seront présentées en fonction de leur classe et de leur groupement fonctionnel. Une recherche préliminaire des substances présentées dans l'annexe 1 a permis de déterminer la quantité de données présente dans la littérature. Cette première étape, réalisée à partir de renseignements de l'Organisation de Coopération et de Développement économique (OCDE), a

permis d'identifier les pays, soit le Canada, les États-Unis, le Japon et l'Union européenne, qui ont effectué des évaluations de risque ou préalables de ces substances. Cette première étape a également permis de réaliser que plusieurs substances étaient disponibles et que le nombre retenu était encore trop élevé. Ainsi, les odeurs de classes animale et ambrée, présentées dans le tableau 2.2, ont été priorisées pour la réalisation d'une recherche exhaustive dans le cadre de cet essai.

Tableau 2.2 Fragrances priorisées pour l'évaluation de danger environnemental (inspiré de Kim et al., 2016)

Classe des odeurs	Groupe ment fonctionnel	CAS	Nom commun
Ambrée	Alcool	70788-30-6	Timbéról
Ambrée	Cétone	54464-57-2	Isocycle mone E
Ambrée	Éther cyclique	13786-79-3	Cédroxyde
Ambrée	Éther cyclique	154171-76-3	Ambre spírolène
Ambrée	Éther cyclique	57345-19-4	Ambre ketal
Animale	Alcool	41199-19-3	Ambrinol
Animale	Cétone	502-72-7	Cyclopentadécane
Animale	Cétone	14595-54-1	(4Z)-Cyclopentadéc-4-èn-1-one
Animale	Cétone	541-91-3	3-Méthylcyclopentadéc-1-one
Animale	Cétone	82356-51-2	Méthylcyclopentadéc-2-èn-1-one
Animale	Cétone	37609-25-9	5-Cyclohexadécèn-1-one
Animale	Cétone	3100-36-5	Cyclohexadéc-8-èn-1-one
Animale	Cétone	542-46-1	Civetone
Animale	Cétone	15323-35-0	Phantolide
Animale	Cétone	13171-00-1	4-Acét yl-6-tert-butyl-1,1-diméthylindane
Animale	Cétone	68140-48-7	Traséolide
Animale	Cétone	1506-02-1	1-(5,6,7,8-Tétrahydro-3,5,5,6,8,8-hexaméthyl-2-naphthyl)éthan-1-one
Animale	Éther cyclique	1222-05-5	Galaxolide
Animale	Éther cyclique	29895-73-6	Glycér alacétate de phenylacétaldéhyde
Animale	Éther cyclique	18096-62-3	Indolétal
Animale	Ester	141773-73-1	Helvetolide
Animale	Ester	236391-76-7	Romandolide

Tableau 2.2 Fragrances priorisées pour l'évaluation de danger environnemental (suite) (inspiré de Kim et al., 2016)

Classe des odeurs	Groupe fonctionnel	CAS	Nom commun
Animale	Ion ammonium	81-14-1	Musc cétone
Animale	Ion ammonium	81-15-2	Musc xylène
Animale	Ion ammonium	83-66-9	Musc ambrette
Animale	Ion ammonium	116-66-5	Moscène
Animale	Ion ammonium	145-39-1	Musc tibétène
Animale	Lactone	6707-60-4	Cervolide
Animale	Lactone	54982-83-1	Zénolide
Animale	Lactone	123-69-3	Ambrettolide
Animale	Lactone	105-95-3	Éthylène brassylate
Animale	Lactone	106-02-5	Exaltolide
Animale	Lactone	34902-57-3	Globalide

Afin de compléter les informations gouvernementales, une revue de la littérature scientifique a été réalisée pour chacune des substances présentées dans le tableau 2.2. Cette recherche a été effectuée à l'aide de moteurs de recherche comme *ScienceDirect*, *Scopus*, *Wiley Online Library* et l'outil de découverte de l'Université de Sherbrooke. Par manque de temps, les fragrances qui possèdent une cétone comme groupement fonctionnel et une odeur de classe animale n'ont pas pu être évaluées. Un tableau illustrant la structure de ces molécules est présenté à l'annexe 2.

Des informations sur les propriétés physico-chimiques des composés et leurs concentrations dans l'environnement ont été recherchées. Cependant, ce sont les données relatives à la persistance, au caractère de bioaccumulation et aux effets toxiques des substances sur l'environnement qui constituent la majeure partie de leur évaluation.

La persistance est, ici, définie par le temps que prend la substance pour se dégrader dans le milieu ou encore par son temps de demi-vie. Ainsi, une substance dont le temps de demi-vie est élevé ou dont le taux de dégradation reste faible (5 % dans l'eau par exemple), est considérée comme persistante dans leur matrice. Alors, les espèces qui se retrouvent dans ce milieu sont plus susceptibles d'établir un contact avec cette molécule sur une longue période. (Roger, 2010)

Afin de modéliser la concentration d'une substance dans les différents compartiments environnementaux il est possible d'utiliser le coefficient de partage octanol-eau (K_{oe}), le coefficient de partage carbone organique-eau (K_{oc}), le coefficient sol-air (K_{sa}), définis en $\log K_{oe}$, $\log K_{oc}$ et $\log K_{sa}$. Ainsi, un $\log K_{oc}$ élevé est un bon indicateur de présence dans les sols et les sédiments. D'autre part, un composé dont le $\log K_{oe}$

est élevé présente un potentiel de bioaccumulation plus important pour les organismes aquatiques. La bioaccumulation peut être définie comme la concentration nette dans un organisme suites aux processus d'absorption, d'accumulation dans les tissus et d'élimination d'une substance pour l'ensemble des voies d'exposition. Cette propriété peut ainsi engendrer l'accumulation d'un polluant dans les tissus lipidiques et entraîner un phénomène de bioamplification le long de la chaîne trophique lorsque la substance à l'étude est hydrophobe et peu soluble. Le facteur de bioconcentration (FBC) ou le facteur de bioaccumulation (FBA) correspondent aux paramètres qui ont permis dans cet essai d'évaluer le caractère bioaccumulable des substances qui tout comme les coefficients de partage, plus le facteur de bioconcentration est élevé, plus la substance a une tendance à se retrouver dans l'organisme biologique en plus d'augmenter le risque de bioamplification dans la chaîne trophique. (Roger, 2010)

Pour les effets relatifs à la toxicité des substances, l'évaluation réalisée présente un portrait global qui rapporte autant les effets de toxicité aiguë que chroniques sur des espèces aquatiques et terrestres. De cette façon, plusieurs paramètres ont pu être observés sur les composés, soit les effets létaux, les effets sur la reproduction, les effets sur la croissance, etc. Ces paramètres sont principalement constatés chez différentes espèces de la chaîne trophique aquatique, soit des algues, des daphnies, des poissons ainsi que certains vers et arthropodes.

L'information récoltée provient d'articles scientifiques qui suivent des protocoles standardisés, tels que la méthode du guide européen C.2 (toxicité aiguë pour les daphnies), le guide OCDE 301F (test sur la respiration manométrique) ou *EPA OPPTS 850.1730* (test de bioconcentration chez le poisson). Ceux-ci sont principalement des lignes directrices qui présentent des paramètres comme la durée du test, le pH ou encore le modèle animal qui permet la réalisation du test et l'interprétation des résultats. L'utilisation de données basées sur ce type de protocole a été priorisée pour s'assurer de la qualité de l'information et de la méthodologie. Toutefois, les renseignements sur les substances émergentes comme les fragrances peuvent être limités dans la littérature. Afin d'obtenir plus d'informations et de réaliser une évaluation plus complète de ces fragrances, l'utilisation de données dites modélisées ou prédites a été acceptée. Les modèles de relation quantitative structure-activité (RQSA) correspondent à des modèles mathématiques qui prédisent les propriétés des molécules à partir de leur structure. Ainsi, les modèles prédisent les propriétés physico-chimiques et biologiques ainsi que la persistance des substances dans l'environnement. L'utilisation de logiciels comme ECOSAR™, EPI Suite™ et VEGA permet l'estimation des propriétés à l'aide de modèles tels que KOWWIN™, OASIS et BCFWIN™. Ces trois exemples de modèles prédisent le log K_{oe} et le facteur de bioaccumulation de la substance. (Agence européenne des produits chimiques [ECHA], 2016b)

Comme mentionné plus haut, plusieurs de ces informations provenaient de sites gouvernementaux comme l'US EPA, l'Agence européenne des produits chimiques (ECHA) et la liste intérieure des substances

canadienne (LIS). En plus de relater les faits sur les substances, ces organisations émettent des conclusions sur leur risque en fonction des données sur leur persistance, leur caractère bioaccumulable et leur toxicité. Pour y arriver, les organisations ont basé leurs recherches sur des critères précis qui permettent d'évaluer les risques associés aux trois paramètres cités. Les critères de chacune de ces organisations sont indiqués dans le tableau 2.3.

Tableau 2.3 Critères des organisations gouvernementales utilisés pour l'évaluation de risque des nouvelles substances (compilation d'après : le Règlement sur la persistance et la bioaccumulation, 2018, p. 5, le Règlement sur l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances [REACH], 2011, p. 4 et US EPA, 2012, p.7-3)

Propriété	Critères canadiens pour le banissement des contaminants		Critères européens pour l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques et des restrictions applicables à ces substances (REACH)		Critères américains pour les nouveaux contaminants		
Persistance	Non persistant	Persistant (jours)	Persistant (jours)	Très persistant (jours)	Non persistant (jours)	Persistant (jours)	Très persistant (jours)
Air		≥ 2			≤ 2		> 2
Eau		≥ 182	> 40	> 60	< 60	≥ 60	> 180
Sédiment		≥ 365	> 120	> 180	< 60	≥ 60	> 180
Sol		≥ 182	> 120	> 180	< 60	≥ 60	> 180
Bioaccumulation (Bioacc.)	Non Bioacc.	Bioacc.	Bioacc.	Très bioacc.	Non Bioacc.	Bioacc.	Très Bioacc.
Log K _{oe}		≥ 5					
FBC		$\geq 5\ 000$	$> 2\ 000$	$> 5\ 000$	$< 1\ 000$	$\geq 1\ 000$	$\geq 5\ 000$
Toxicité	Paramètre de toxicité		Paramètre de toxicité		Non toxique	Toxique	Très toxique
	La toxicité de la substance dépend de la définition présente dans la <i>loi canadienne sur la protection de l'environnement</i> qui définit la « toxicité intrinsèque » comme une substance qui peut pénétrer ou peut pénétrer à des concentrations qui ont un impact à avoir un effet nocif sur le milieu ou sur les organismes du milieu, à être un risque pour la vie essentielle et à porter préjudice à la santé humaine.		-Est toxique si la concentration sans effet observable (CSEO) chronique et la concentration avec effet (CE10) pour les organismes aquatiques sont inférieures à 0,01 mg/L; -Est toxique lorsque la substance est évaluée comme cancérogène, mutagène et à risque pour la reproduction en conformité avec le règlement (CE) n° 1272/2008; -Est toxique lorsqu'il y a toxicité chronique conformément au règlement (CE) n° 1272/2008		Toxicité chronique > 10 mg/L (poissons)	Toxicité chronique 0,1-10 mg/L	Toxicité chronique $< 0,1$ mg/L

Ainsi, le chapitre suivant présente les informations disponibles pour les 22 substances précédemment identifiées. Étant donné que le Centre d'expertise en analyse environnemental du Québec se trouve au Canada, les conclusions du gouvernement canadien pour les différentes molécules sont présentées.

3. PROPRIÉTÉS DES FRAGRANCES ET ÉVALUATION DU DANGER ENVIRONNEMENTAL

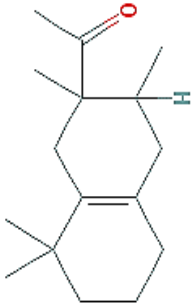
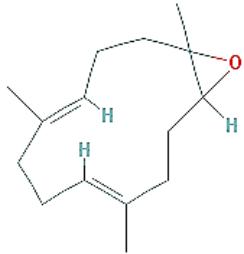
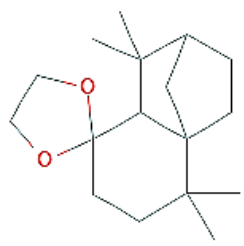
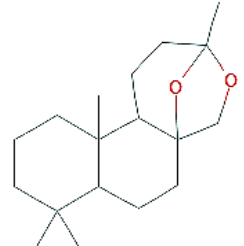
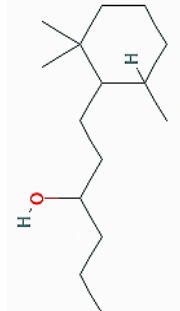
Ce chapitre répond à l'objectif spécifique qui consiste à présenter le potentiel de danger écotoxicologique des fragrances synthétiques identifiées dans la section précédente. L'information disponible est regroupée en fonction des différentes classes d'odeurs attribuées aux substances sélectionnées. Compte tenu de la quantité importante de fragrances naturelles et synthétiques considérées (4000), l'évaluation de leur dangerosité se concentrera sur les odeurs d'origine animale de type ambré et animal. Les caractéristiques physico-chimiques de chacun des composés, leur présence dans l'environnement, leur potentiel de bioaccumulation et leur potentiel de toxicité sur la faune seront présentés.

3.1 Les fragrances de type ambré

L'odeur ambrée provient, à l'origine, de l'ambre gris, un composé solide récupéré sur les côtes de différents pays comme le Brésil, le Japon et la Norvège. Selon la littérature, cette substance provient de sécrétions produites par le tube digestif des cachalots dans lesquelles ont été retrouvés des polypes et des seiches (Chastrette, s.d., *Nouveau dictionnaire d'histoire naturelle, appliquée aux arts, à l'agriculture, à l'économie rurale et domestique, à la médecine, etc. Par une Société de naturalistes et d'agriculteurs : 1 : ABA-ANI*, 1870). Ces sécrétions sont de faible densité ce qui leur permet de flotter à la surface de l'eau pour ensuite atteindre les côtes où elles s'assècheront en une argile cassante. Leurs odeurs très complexes varient selon l'origine et la durée de flottaison du composé. (Chastrette, s.d.) Dans certains cas, les pêcheurs pouvaient récupérer, pendant la chasse ou sur les plages, l'ambre gris directement de l'animal, puisque ce dernier en devenait malade ou en raison de son âge. (*Nouveau dictionnaire d'histoire naturelle, appliquée aux arts, à l'agriculture, à l'économie rurale et domestique, à la médecine, etc. Par une Société de naturalistes et d'agriculteurs : 1 : ABA-ANI*, 1870). Aujourd'hui, les odeurs de type ambré utilisées dans les produits de soins corporels sont principalement semi-synthétiques, c'est-à-dire, issues de plantes et de mousses ou complètement synthétiques (Chastrette, s.d.).

Cinq molécules ont été identifiées dans cette catégorie, soit l'isocyclemone E, le cédroxyde, l'ambre spiolène, l'ambre ketal et le timbérol. Chacune de ces molécules est conçue synthétiquement pour produire une odeur ambrée spécifique. Ces composés sont présentés dans le tableau 3.1 qui illustre leur structure moléculaire ainsi que leurs différents groupements fonctionnels.

Tableau 3.1 Fragrances de type ambré. (inspiré de Kim et al., 2016)

Nom commun				
<p>Isocyclemonone E</p> <p>1-(2,3,8,8-tétraméthyl-1,2,3,4,5,6,7,8-octahydronaphthalèn-2-yl)éthanone</p> <p>Boisvelone</p> <p>Iso E Super</p> <p>(CAS 54464-57-2)</p>	<p>Cédroxyde</p> <p>1,5,9-triméthylcyclododéca-1,5,9-trièneépoxyde;</p> <p>1,5,9-triméthyl-13-oxabicyclo[10.1.0]tridéca-4,8-diène</p> <p>(CAS 13786-79-3)</p>	<p>Ambre spiolène</p> <p>Spiro[1,3-dioxolane-2,8'(5'H)-[2H-2,4a]méthanonaphthalène]</p> <p>Hexahydro-1',1',5',5'-tetraméthyl-spiro(1,3-dioxolane-2,8'(5'H)-(2H-2,4a)methanonaphthalene)</p> <p>(CAS 154171-77-4)</p>	<p>Ambre ketal</p> <p>Dodécahydro-3,8,8,11a-tétraméthyl-5H-3,5a-époxy-naphth(2,1-c)oxépine</p> <p>Dodécahydro-3,8,8,11a-tétraméthyl-5H-3,5a-époxy-naphth[2,1-c]oxépin</p> <p>(CAS 57345-19-4)</p>	<p>Timbérol</p> <p>2,2,6-Triméthyl-α-propylcyclohexano-propanol</p> <p>(CAS 70788-30-6)</p>
				

L'Isocyclemonone E et le Timbérone diffèrent des trois autres molécules, car ils possèdent un groupement fonctionnel cétone ou un alcool, alors que les trois autres se composent d'un éther cyclique. Cependant, les cinq fragrances présentent des propriétés physico-chimiques similaires indiquées dans le tableau 3.2. L'ensemble de ces données physico-chimiques et environnementales est présenté à l'annexe 3.

Tableau 3.2 Résumé des propriétés physico-chimiques des fragrances d'odeurs de type ambré

Propriété	Intervalle	Unité
Masse	220 - 270	g/mol
Densité	0,920 - 1,030	g/cm ³
Température de congélation	10 - 120	°C
Température d'évaporation	280 - 315	°C
Pression de vapeur	0,0005 - 0,006	mm Hg
Solubilité	0,00007 - 0,0005	mol/L
Log K _{oa} (octanol-air)	6,50 - 8,45	s.o.
Log K _{oe} (octanol-eau)	4,75 - 5,30	s.o.

3.1.1 L'isocyclemonone E (CAS 54464-57-2)

L'Isocyclemonone E est une substance utilisée depuis les années 1950. Elle provient de l'addition chimique entre le diène du myrcène et l'alcène du 3-méthyl-3-penten-2-one, suivie d'une cyclisation intramoléculaire sous condition acide (Surburg et Panten, 2016). La production annuelle de ce composé, d'une masse molaire de 234,383 g/mol, s'élève à 3 000 tonnes. Elle est utilisée principalement dans les savons, les détergents et les shampooings. (Chen, Pauly, Rehfus et Bester, 2009, Gautschi, Bajgrowicz et Kraft, 2001, International Flavors & Fragrances inc. [IFF], 2018, Ortiz de García et al., 2013, US EPA, 2018 b)

La compagnie Vigon (2015) et l'Agence européenne des produits chimiques (ECHA) (2011a) présentent l'Isocyclemonone E, à partir de données expérimentales, comme une substance peu persistante dans l'environnement avec des temps de demi-vie inférieur à une journée dans l'eau, de 10 jours dans des sédiments de rivière, de 4,2 jours dans des sols agricoles et de 6 jours dans un sol fertilisé avec des boues d'épuration (ECHA, 2011a). Des données modélisées par le gouvernement danois estiment des temps de demi-vie dans l'eau de 60 jours, dans le sol de 120 jours et dans les sédiments de 542 jours (Danish Environmental Protection Agency, 2016).

Des études ont été réalisées afin d'évaluer la concentration de l'Isocyclemonone E dans les boues de station d'épuration des eaux et dans les milieux aquatiques. En Europe, des concentrations de 0,008 à 16,5 µg/L ont été détectées dans les systèmes de traitement des effluents des eaux usées municipales d'Espagne,

d'Allemagne et de l'ouest des Balkans. En Chine orientale, une concentration de 2,68 µg/L a été mesurée dans les systèmes de traitement des effluents d'eaux usées municipales. (Bester, Hüffmeyer, Schaub et Klasmeier, 2008, Chen et al., 2009, Klaschka et al., 2013, Ortiz de García et al., 2013, Peng et al., 2018, Terzić et al., 2008) L'équipe allemande de Klaschka et al. (2013) a mesuré la concentration d'Isocyclemone E à une distance d'un kilomètre des sites de rejets municipaux et présente une diminution des concentrations de 98 % passant de 6,31 µg/L à 0,080 µg/L par rapport au site de rejet, lorsque diluée dans le cours d'eau. Les résultats de cette équipe présentent également une concentration moyenne d'Isocyclemone E dans l'affluent d'un site de traitement d'eaux usées de 22,0 µg/L laquelle, après traitement secondaire, est réduite de 82,9 % dans l'effluent (Klaschka et al., 2013). Des études américaines détectent des concentrations dans les systèmes de traitement des effluents des eaux usées municipales allant de 3,25 µg/L à 3,47 µg/L (Simonich, Begley, Debaere et Eckhoff, 2000). Selon Simonich et al. (2000), l'utilisation d'un traitement primaire favorise la réduction de l'Isocyclemone E de 59,2 %, alors que la présence d'un traitement secondaire diminue sa concentration de 96,8 % ce qui représente moins de 0,110 µg/L. Une autre étude, réalisée dans des boues d'épuration du Delaware, identifie un intervalle de concentration de l'Isocyclemone E allant de 7 000 à 30 000 µg/kg (DiFrancesco, Chiu, Standley, Allen et Salvito, 2004).

Des facteurs de bioconcentration (FBC) de 593 et 603 L/kg ont été mesurés avec le carpe arlequin (*Lepomis macrochirus*) respectant ainsi les exigences canadiennes de bannissement des contaminants bioaccumulables (FBC > 5 000 L/kg) (Vigon, 2015). De plus, une étude réalisée au Missouri avec le *Lemponis macrochirus* pendant 63 jours démontre un FBC de 391 L/kg. L'étude représente les concentrations d'Isocyclemone E dans la chair et les viscères du poisson ainsi que dans le milieu aquatique. Au niveau du sol, un FBC a été estimé à partir de l'équation de Jagger de 1998 et le modèle EUSES donnant une valeur de 5 361 L/kg pour le ver de terre (*Lumbricina*). (ECHA, 2011a) Les données des modèles KOWWINTM et BCFWINTM identifient le log du coefficient de partage octanol-eau (K_{oe}) à 5,18 et le FBC à 1959 kg/L basé à partir du K_{oe} (Organisation de coopération et développement économique [OCDE], 2011).

Différentes études sur la toxicité concluent que la molécule s'avère peu toxique lors d'exposition chronique. Comme l'étude de 21 jours, réalisée avec l'espèce *Daphnia magna*, qui indique une concentration sans effet observable (CSEO) de 28,0 µg/L. Cette toxicité est également présente chez le poisson-zèbre (*Danio rerio*) où la CSEO observée est de 300 µg/L après 30 jours (Vigon, 2015). Les résultats de deux études menées par l'ECHA présentent des CSEO chez le *Lumbriculus variegatus* et *Chironomus riparius* sur une période de 28 jours à 33 300 µg/kg et 102 000 µg/kg respectivement (ECHA, 2011a). Des données de modèles prédictifs RQSA (*Robust Quantitative scratch assay*), estimées par le gouvernement danois, estiment aussi la toxicité de la substance chez le poisson à une concentration létale de 266 µg/L, chez la daphnie à une

concentration d'effets de 203 µg/L et chez l'algue verte à une concentration d'effets de 509 µg/L. Les espèces spécifiques de ces organismes ne sont toutefois pas précisées pour ces données modélisées ainsi que les effets précis observés chez la daphnie et l'algue. (Danish Environmental Protection Agency, 2016)

La revue de la littérature scientifique a permis d'obtenir des données expérimentales et modélisées pour l'Isocyclemone E. Les études indiquent que les concentrations d'effets mesurées, pour observer la toxicité chez différentes espèces aquatiques, sont supérieures aux concentrations généralement détectées dans l'environnement. De plus, l'ECHA qui a produit une évaluation sur la fragrance isocyclemone E conclut que celle-ci n'est pas persistante, ni bioaccumulable et ni toxique selon des critères européens (ECHA, 2011a). Au sens de la catégorisation de la Liste intérieure des substances (LIS) basée sur la loi et les règlements canadiens (tableau 2.4), cette substance ne se classe pas comme une substance persistante, bioaccumulable et toxique (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006h).

3.1.2 Le cédroxyde (CAS 13786-79-3)

Le cédroxyde est produit par la monoépoxydation du 1,5, 9-triméthyl-1, 5,9-cyclododecatriène et possède une masse molaire de 220,356 g/mol (Surburg et Panten, 2016, US EPA, 2018b). Selon la compagnie suisse Firmenich (s.d. a), le cédroxyde se retrouve en grande quantité dans les shampooings et les gels pour le corps avec des concentrations maximales de 6 % et 3 %, respectivement. En 1996, sa production annuelle était évaluée entre une et dix tonnes (1,5,9-trimethylcyclododeca-1,5,9-trine epoxide, 2000). Au Canada, la production annuelle s'élève à moins de 1000 tonnes. (Environnement et changement climatique Canada [ECC], 2016)

Peu d'études expérimentales sont actuellement disponibles pour cette substance. Les seules données disponibles semblent provenir du gouvernement danois qui estime les propriétés physico-chimiques et environnementales à l'aide de modèles prédictifs RQSA.

Les temps de demi-vie prédits à l'aide du modèle *EPI Suite™ level III Fugacity* dans l'air, l'eau, le sol et les sédiments sont respectivement de 0,011, 37,5, 75 et 337,5 jours. Au moyen des modèles mathématiques, le gouvernement danois a également prédit un facteur de bioconcentration (FBC) à partir des sédiments de 2 779 L/kg, une solubilité de 0,443 mg/L et un log K_{oe} de 5,72. (Danish Environmental Protection Agency, 2016)

Des modèles prédictifs ont aussi été utilisés pour évaluer la toxicité aiguë chez la daphnie (*Daphnia magna*), le mené à grosse tête anciennement appelé le mené tête de boule (*Pimephales promelas*) et chez les algues (*Raphidocelis subcapitata* anciennement nommé *Pseudokircheriella subcapitata*). Pour la daphnie, un intervalle de concentrations d'effets sur 50 % des organismes (CE₅₀ : de 250 à 2 250 µg/L) a été évalué, selon les modèles Battery, Leadscope et SciQSAR, sans toutefois préciser le paramètre d'effet. Des CE₅₀ de

30 000 à 95 000 µg/L ont été estimées pour *Raphidocelis subcapitata*. Pour *Pimephales promelas*, une concentration létale médiane (CL₅₀) de 1 000 à 8 000 µg/L a été définie avec les modèles prédictifs Leadscope et SciQSAR. Une CE₅₀ de 63,0 µg/L a finalement été prédite pour les algues vertes avec le modèle ECOSAR™. (Danish Environmental Protection Agency, 2016)

Seules des données modélisées sont disponibles pour réaliser l'évaluation de danger du cédroxyde. Au sens de la catégorisation de la Liste intérieure des substances (LIS) basée sur la loi et les règlements canadiens (tableau 2.4), cette substance se classe comme bioaccumulable et toxique pour l'environnement.

3.1.3 L'ambre spiroène (CAS 154171-76-3)

L'ambre spiroène ou le spiro [1,3-dioxolane-2, 8'(5'H)-[2 h-2,4 a] méthanonaphthalène] est une substance produite synthétiquement depuis 1990 par l'acétylation de l'isolongifolanone à l'aide d'éthylène glycol (Johannes, Heinz-Jürgen et Horst, 2004, Surburg et Panten, 2016). Ce composé possède une masse molaire de 264,409 g/mol et un log K_{oc} de 4,77 (US EPA, 2018b). Aucune information n'est toutefois disponible concernant les volumes de production, d'importation et de la présence de l'ambre spiroène dans l'environnement.

Des études expérimentales de l'ECHA présentent des temps de demi-vie entre 2,32 et 14,25 jours et une dégradation de 59,1 % en demande chimique en oxygène (DCO) après 28 jours dans l'eau. L'US EPA prédit aussi un temps de demi-vie, par modèle mathématique, de 171 jours sans spécifier la composante environnementale à laquelle elle s'applique. (ECHA, 2017d) Des temps de demi-vie ont également été estimés par des modèles mathématiques proposant des valeurs de 0,420 jour dans l'air, 180 jours dans l'eau, 360 jours dans les sols et 1620 jours dans les sédiments (Danish Environmental Protection Agency, 2016).

Aucune donnée de bioaccumulation provenant d'études expérimentales n'est disponible. L'US EPA a utilisé des modèles prédictifs pour estimer un log du coefficient de partage carbone organique-eau (K_{oc}) de 5,31, un facteur de bioconcentration de 368 L/kg et un temps de demi-vie chez le poisson de 108 jours à l'aide des logiciels RQSA. Cette étude ne précise pas si la bioaccumulation a été prédite seulement dans les muscles ou dans le poisson entier. Enfin, les données estimées par l'US EPA et par l'ECHA suggèrent que cette substance comporte un danger de bioaccumulation. (ECHA, 2017d, US EPA, 2018b)

Finalement, des données de toxicité aiguë rapportées par l'ECHA correspondent à une CL₁₀₀ de 4 500 µg/L pour une exposition de 96 h chez le *Danio rerio*, une CE₅₀ de 5 600 µg/L après une exposition de 48 h et une CSEO de 1 000 µg/L chez les crustacés. L'effet sur le taux de croissance des algues (*Desmodimus subspicatus*) a également été mesuré, la CE₅₀ obtenue est de 71 600 µg/L après 72 h d'exposition. (ECHA, 2017d) Des données de toxicité aiguë ont aussi été prédites à l'aide de modèles mathématiques. Ces modèles

présentent une toxicité létale chez le poisson de 228 µg/L, une toxicité létale de 176 µg/L chez la daphnie et une CE₅₀ de 464 µg/L chez l'algue verte (Danish Environmental Protection Agency, 2016).

En somme, peu de données expérimentales sont disponibles pour l'ambre spiolène. Cependant, des données modélisées permettent de compléter les informations nécessaires pour réaliser l'évaluation de danger. Il est à noter que le gouvernement canadien n'a émis aucune étude préliminaire pour cette substance.

3.1.4 L'ambre ketal (CAS 57345-19-4)

L'ambre ketal ou Dodécahydro-3,8,8,11a-tétraméthyl-5H-3,5a-époxy-naphth (2,1-c) oxépine est un composé qui possède une masse molaire de 278,436 g/mol et un log K_{oc} de 5,7 (US EPA, 2018b). Il est utilisé pour sa stabilité aux variations du pH et pour ses propriétés de conservation des molécules de note de tête (Vecchiato et al., 2016, Yadav, Baishya et Dash, 2007). Au Canada, entre une et 1 000 tonnes sont produites et importées annuellement (OCDE, 2011). La synthèse de cette molécule se fait en trois étapes. La première consiste en une réaction d'époxidation du manool en alcool allylique. La deuxième forme une cétone par réaction d'oxydation et, finalement, la troisième est l'acétalisation intramoléculaire de la cétone. (Surburg et Panten, 2016) Pendant plusieurs années, ce composé était l'une des substances les plus utilisées pour donner l'odeur de l'ambre gris en raison de sa grande ressemblance avec la molécule d'origine. Encore aujourd'hui, il est présent dans les produits cosmétiques pour homme, comme dans les gels pour le corps et dans les savons à une concentration maximale de 1 % (Büttner, Burschka, Junold, Kraft et Tacke, 2007, Yadav et al., 2007).

Deux études expérimentales, réalisées en 1996 et 1998 par l'ECHA et qui respectent les guides 301F (*Ready Biodegradability : Manometric Respirometry Test*) et 302C de l'OCDE (*Inherent Biodegradability : modified MITI test [II]*), ont permis d'évaluer la propriété de dégradation de l'ambre ketal. Ces deux études utilisent les matières en suspension provenant d'une boue de station d'épuration d'eaux usées ayant un traitement biologique à une concentration de 100 mg/L. Plus spécifiquement, l'étude de 1996 présente un taux de dégradation de 38 % après 33 jours, alors que l'étude de 1998 obtient une dégradation de 88 % en 31 jours, dont 70 % avant le quatorzième jour. Ainsi, les deux études concluent à des résultats opposés, puisque selon l'étude de 1996, l'ambre ketal est peu biodégradable, alors que l'étude de 1998 présente la molécule comme très biodégradable. Cette fluctuation peut s'expliquer par l'utilisation de concentrations distinctes et de la variabilité des boues dans lesquelles les communautés bactériennes sont différentes. Ainsi, la communauté bactérienne de la première expérimentation peut avoir été saturée plus rapidement, ce qui a engendré cette valeur de biodégradabilité. (ECHA, 2018b) De plus, des modèles RQSA suggèrent que la substance est persistante dans l'air et dans le sol en raison des temps de demi-vie estimés à 999 jours pour l'oxydation en radicaux libres hydroxyde et à 182 jours, respectivement (OCDE, 2011). D'autres modèles

RQSA présentent des temps de demi-vie de 0.21 jour dans l'air, de 180 jours dans l'eau, de 360 jours dans les sols et de 1 620 jours dans les sédiments (Danish Environmental Protection Agency, 2016).

Une étude de Vecchiato (2016) expose la concentration de cette molécule dans les eaux de surface de Venise. Selon l'article, des concentrations dans les eaux de surface de dix-sept molécules présentes dans des produits de soins corporels qui se situent entre 0,030 µg/L et plus de 10 µg/L. Plus spécifiquement, l'ambre ketal a été mesuré à des concentrations allant de non détectable à 1,73 µg/L. (Vecchiato et al., 2016)

En raison de l'absence d'étude expérimentale concernant la bioaccumulation de l'ambre ketal, seules des données modélisées par RQSA ont été considérées. Ainsi, les données estimées par les logiciels Gobas, OASIS et BCFWIN™ proposent respectivement des FBC à partir des sols de 91 200 L/kg, de 35 480 L/kg et de 3235 L/kg (OCDE, 2011).

Deux études effectuées en 2017 présentent la toxicité de la molécule dans l'eau douce. La première démontre l'absence de toxicité chez l'espèce *Daphnia magna* dans les conditions expérimentales du test avec une CE₅₀ supérieure à 1 070 µg/L après 48 h d'exposition. La seconde étude, réalisée chez les algues et les cyanobactéries, évalue les effets de l'ambre ketal sur la croissance des organismes après une exposition de 72 h. Elle conclut que les CE₅₀ et CE₁₀ doivent être supérieures à 1 070 µg/L pour causer un effet négatif sur leur croissance. Une CSEO et une CMEO de 733 et 1 107 µg/L ont également été déterminées à l'aide de cette étude. (ECHA, 2018b) Finalement, des données RQSA proposent une CL₅₀ chez le poisson allant de 240 µg/L à 2 800 µg/L selon les logiciels Oasis Forecast M v 1.10, Aster et PNN et une CE₅₀ chez la daphnie de 6 900 µg/L (OCDE, 2011).

En somme, autant d'études expérimentales que de données modélisées sont disponibles dans la littérature pour l'ambre ketal. Néanmoins, ce nombre est très faible et, conformément à la catégorisation de la liste intérieure des substances canadiennes (LIS), l'ambre ketal ne répond pas aux critères de risque canadiens pour l'aspect environnemental et pour la santé humaine. Selon cette catégorisation, cette substance, sans être toxique, est identifiée comme persistante et bioaccumulable (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006j).

3.1.5 Le Timbéról (CAS 70788-30-6)

Le timberol ou 2,2, 6-triméthyl- α -propyl-cyclohexanepropanol est une substance reconnue pour son odeur ambrée et légèrement boisée. Elle est présentée à une concentration maximale de 1 % (m/m) dans plusieurs produits de soins corporels comme les pains de savon, les détergents et les shampooings (Firmenich, s.d.c). Elle est fabriquée synthétiquement par l'aldolisation du citral avec le 2-pentanone en présence d'une base, suivi d'une cyclisation intramoléculaire en milieux acide et par hydrogénation. (Fráter, Bajgrowicz et Kraft, 1998, Surburg et Panten, 2016)

Bien qu'aucune donnée expérimentale ne soit disponible pour cette molécule, des valeurs prédites sont disponibles. En effet, le gouvernement danois présente des temps de demi-vie dans l'eau de 37,5, de 75 jours dans le sol et de 337,5 jours dans les sédiments. De plus, la présence de ce composé dans les boues d'épuration estime que les traitements biologiques tertiaires réduisent de 91,13 % le timbérool dans les effluents, puisque 90,14 % du composé est adsorbé dans les boues (Danish Environmental Protection Agency, 2016). Des log K_{oe} supérieurs à 5,0 ont été estimés par le modèle KOWWIN™ ainsi qu'un FBC de 3 113 L/kg. Des données de toxicité estimées chez les menés à grosse tête (*Pimephales promelas*), les daphnies et les algues (espèces non disponibles) présentent respectivement une CL_{50} de 1 160, une CE_{50} de 13 620 et une CE_{50} de 16 460 µg/L. (Danish Environmental Protection Agency, 2016)

Ainsi, aucune étude expérimentale n'est disponible pour réaliser l'évaluation de danger du timbérool. Néanmoins, selon les critères du tableau 2.4, le gouvernement canadien conclut que cette substance s'avère non persistante dans l'eau, mais qu'elle l'est dans les sédiments en plus d'être bioaccumulable et faiblement toxique.

3.2 Les fragrances de type animal

Les molécules de type animal font référence aux odeurs associées aux glandes retrouvées chez différentes espèces terrestres comme les civettes et les castors (Surburg et Panten, 2016). Ces odeurs, principalement utilisées dans les produits pour homme donnent une odeur cuivrée et virile. Ils servent également de fixatif pour les molécules plus volatiles. (Olfastory, 2004)

De façon plus spécifique, l'odeur de musc provient notamment des glandes situées entre l'abdomen et les parties génitales du mâle de la famille des moschidés, mammifères ruminants similaires aux cervidés, principalement retrouvés en Chine et au Tibet (Sommer, 2004). Depuis 1979, la chasse pour le musc est interdite dans plusieurs régions du monde, ce qui oblige les compagnies à développer des substances synthétiques afin de reproduire son odeur (Olfastory, 2004, Sommer, 2004). Le castoréum est une autre source naturelle de musc extraite des castors et des civettes. Cependant, la chasse aux castors d'Amérique est aussi interdite, même si cet animal ne détient plus un statut précaire. De plus, la sécrétion très huileuse produite par sa glande située près de ses parties génitales rend difficile son application dans le domaine de l'esthétique (Olfastory, 2004). Bien que la civette ne possède pas de statut particulier, la technique utilisée, pour extraire le castoréum de la glande cause la mort de l'animal, ce qui pose problème sur le plan éthique (Olfastory, 2004). Ainsi, afin de limiter l'exploitation animale et assurer la survie de ces espèces, la fabrication de ces molécules est requise de façon synthétique. (Olfastory, 2004)

En référence à la catégorisation réalisée précédemment, 33 fragrances ont été identifiées pour leur odeur de type animal. Comme pour les molécules de type ambré, le tableau 3.3 résume les propriétés physico-chimiques de ces composés. L'ensemble des informations physico-chimiques de ces fragrances est décrit

dans l'annexe 3. Chacune de ces molécules est présentée dans les tableaux 3.4 à 3.9 pour introduire les substances en fonction de leur groupement fonctionnel.

Tableau 3.3 Propriétés physico-chimiques des fragrances de type animal

Propriété	Intervalle	Unité
Masse molaire	175-260	g/mol
Densité	0,845-1,25	g/cm ³
Température de congélation	-30-135	°C
Température d'évaporation	220-380	°C
Pression de vapeur	0,000 005- 0.880	mm Hg
Log K _{oa} (octanol-air)	5,05-9,45	NAP
Log K _{oc} (octanol-eau)	1,30-7,85	NAP

Le premier groupe fonctionnel constituant les fragrances de cette classe d'odeur est les esters. Le tableau 3.4 illustre les deux substances identifiées, soit l'helvetolide et le romandolide. Ce tableau présente aussi l'ambrinol, le seul alcool de cette classe d'odeur.

3.2.1 L'helvetolide (CAS 141773-73-1) et le romandolide (236391-76-7)

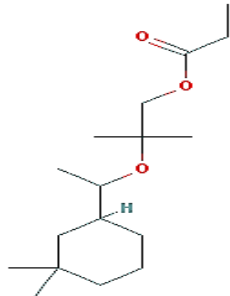
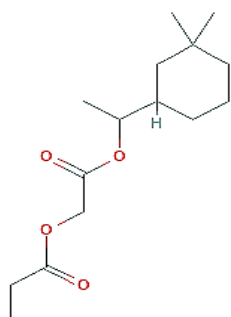
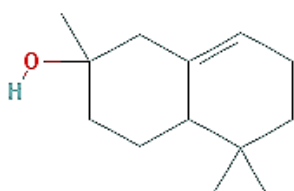
L'helvetolide et le romandolide font partie de la 4^e génération des muscs et possèdent une grande ressemblance moléculaire (Eh, 2004). Ces composés, présentés dans le tableau 3.4, sont synthétisés à partir d'un alcool secondaire le 1-(3,3-diméthylcyclohexyl)-éthanol. Pour former l'helvetolide, l'alcool secondaire réagit dans un premier temps avec le 2,2-diméthyloxirane. Le produit de cette réaction réagit dans un deuxième temps avec l'acide propanoïque. Le romandolide est produit par la réaction de l'alcool secondaire avec l'acide 3-chloropropanoïque, suivi d'une réaction avec l'acide propanoïque. (Eh, 2004, Philip et Walter, 2004) Leur proportion dans les produits de soins corporels diffère. Selon la compagnie Firmenich (Firmenich, s.d.b), l'helvetolide peut se retrouver à des concentrations maximales de 1 à 4 % (m/m), alors que le romandolide peut être observé à des concentrations allant de 4 à 18 % (m/m).

Les deux molécules sont considérées peu persistantes dans l'eau avec un temps de demi-vie de 38 jours, mais elles s'avèrent persistantes dans les sédiments et le sol avec des temps de demi-vie de 338 jours et 75 jours. (Federal Institute for Occupational Safety and Health, 2017). Selon l'ECHA (2013c), les deux fragrances se montrent facilement biodégradables, particulièrement en milieu basique (pH 9). Cependant, l'helvetol, la molécule fille produite par dégradation primaire de l'helvetolide est faiblement biodégradable (19 % de dégradation) (ECHA, 2013c).

Selon une étude espagnole, l'helvetolide est présent dans un intervalle de concentration allant de 0,021 à 0,070 µg/L dans un effluent municipal, alors que le romandolide se retrouve à une concentration moyenne

de 0,056 µg/L (Arbulu et al., 2011). Une autre étude présente également des concentrations du romandolide dans les eaux de surface allant de 0,073 à 0,306 µg/L. (Corada-Fernández et al., 2017)

Tableau 3.4 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel est un ester ou un alcool
(inspiré de Kim et al., 2016)

Noms communs		
<p>Helvetolide</p> <p>1-propanol,2-[1-(3,3-diméthylcyclohexyl)éthoxy]-2-méthyl-3,3-</p> <p>Diméthylcyclohexyléthoxy isobutylpropanoate</p> <p>(CAS 141773-73-1)</p>	<p>Romandolide</p> <p>Acide (1-oxopropoxy)-,1-(3,3-diméthylcyclohexyl) éthyle ester acétique</p> <p>(CAS 236391-76-7)</p>	<p>Ambrinol</p> <p>1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-2,5,5-triméthyl-2-naphthalénol 2,5,5-</p> <p>Trimethyl-octahydro-2-naphthalénol</p> <p>(CAS 41199-19-3)</p>
		

Selon une étude espagnole, l'helvetolide est présent dans un intervalle de concentration allant de 0,021 à 0,070 µg/L dans un effluent municipal, alors que le romandolide se retrouve à une concentration moyenne de 0,056 µg/L (Arbulu et al., 2011). Une autre étude présente également des concentrations du romandolide dans les eaux de surface allant de 0,073 à 0,306 µg/L. (Corada-Fernández et al., 2017)

D'autres données démontrent que l'helvetolide s'accumule davantage que le romandolide avec des FBC pour l'helvetolide de 2 009 L/kg chez le poisson (espèce non connue), de 3 884 L/kg chez le ver de terre et de 2 326 L/kg chez des espèces benthiques, tandis que le romandolide possède des valeurs de FBC de 404, 309 et 3,15 L/kg pour ces différents organismes (ECHA, 2017a, Federal Institute for Occupational Safety and Health, 2017). Ainsi, l'helvetolide est plus susceptible de se bioamplifier dans la chaîne trophique que le romandolide (Boethling, 2011, Seyfried, Boschung, Miffon, Ohleyer et Chaintreau, 2014).

Différentes études ont été réalisées pour déterminer la toxicité de ces deux substances. Selon les études présentées par l'ECHA, l'helvetolide cause des effets toxiques létaux chez la truite arc-en-ciel à des concentrations de 3 400 µg/L après 96 h, alors qu'une CE₅₀ supérieure à 1 100 µg/L est identifiée chez *Raphidocelis subcapitata* pour les effets de croissance. Chez l'espèce *Daphnia magna*, des effets sur la

reproduction et la mortalité sont observés à 180 µg/L d'helvetolide après 21 jours d'exposition. (ECHA, 2013c, 2016a) Des données modélisées suggèrent aussi des effets toxiques de l'helvetolide chez le poisson (CL₅₀), la daphnie (CE₅₀), l'algue (CE₅₀) et le ver de terre à des concentrations de 0,000 002 4 µg/L, 0,000 031, 0,000 198 et 0,214 µg/L (Homem et al., 2015).

Pour le romandolide, des études de toxicité indiquent que, chez l'algue *Desmodesmus subspicatus*, des concentrations supérieures à 4 190 µg/L sont nécessaires pour causer des effets sur la croissance et le développement de la population algale après 72 heures d'exposition. Alors qu'une étude réalisée avec la truite arc-en-ciel présente une toxicité létale chez 50 % et 100 % des poissons à 1 260 et à 1 780 µg/L. (ECHA, 2013c, 2016a)

Quelques études présentent des données expérimentales et modélisées pour ces deux substances quant à la persistance, la capacité de bioaccumulation et les effets toxiques de ces molécules sur certains organismes. Le nombre d'informations reste cependant limité, ce qui peut expliquer qu'aucune évaluation n'a été émise par le gouvernement canadien sur ces deux substances.

3.2.2 L'ambrinol (CAS 41199-19-3)

L'alcool tertiaire ambrinol ou le 2,5, 5-triméthyl-1, 2,3, 4,4 a, 5,6, 7-octahydro-naphthalène-2-ol, présenté dans le tableau 3.4, peut produire, lors de sa synthèse, jusqu'à quatre énantiomères. Chacun de ces énantiomères présente une odeur caractérisée comme animale, ambrée ou boisée qui permet une utilisation variée dans plusieurs produits (Justicia et al., 2008). Il peut être produit de deux façons, soit directement à partir de l'ambre gris ou encore de la thermolyse de la β-ionone (Perring, Surburg et Panten, 2016). Cette molécule est importée et produite annuellement en petite quantité, soit entre 1 et 100 tonnes. Selon la compagnie Firmenich (2016), ce composé demeure très stable dans plusieurs produits comme les détergents, les savons et les gels pour le corps, mais des concentrations maximales de 0,08 % (m/m) sont utilisées. Leur faible concentration dans les produits peut expliquer le peu d'informations disponibles dans la littérature. Toutefois, selon la compagnie Indukern (2006), le composé est considéré comme ni persistant ni bioaccumulable et ni toxique dans l'environnement lorsque sa concentration est inférieure à 0,1 % (m/m) dans les produits.

En somme, peu d'informations sont disponibles sur les propriétés environnementales de l'ambrinol. La LIS catégorise cette substance comme non persistante dans l'eau et le sol avec un temps de demi-vie de 37,5 jours (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006g). De plus, le gouvernement danois prédit un temps de demi-vie de 337,5 jours dans les sédiments. Elle est par ailleurs considérée comme peu bioaccumulable avec un log K_{oe} estimé à 3,9 et un FBC de 200 L/kg. (Danish Environmental Protection Agency, 2016)

Le troisième groupe fonctionnel de cette classe d'odeurs contient cinq substances, soit le, le musc cétone, le musc xylène, le musc ambrette, le musc tibétène et le musc moscène. Comme présenté dans le tableau 3.5, ces substances sont définies par leur groupement ammonium présent dans leur structure.

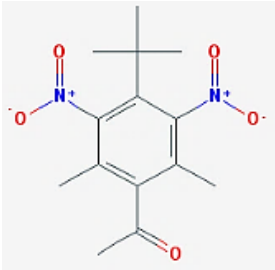
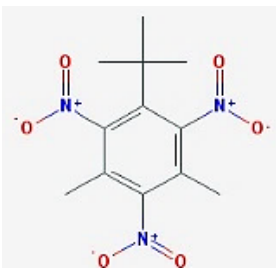
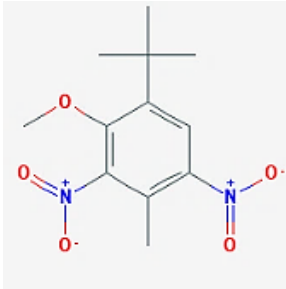
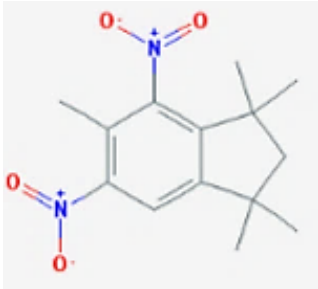
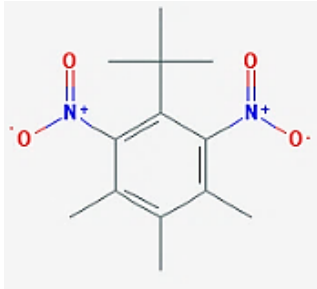
3.2.3 Le musc cétone (CAS 81-14-1)

Le 2-acetyl-5-tert-butyl-4, 6-dinitro-1, 3-diméthylbenzène, mieux connu sous le nom générique musc cétone, est une substance comportant deux groupements nitrates. Pour synthétiser cette substance, le 1,3-diméthyl-5-tert-butylbenzène subit une réaction d'acétylation Friedl-Crafts qui est suivie d'une nitrification avec l'acide nitrique (Surburg et Panten, 2016). Sa production américaine varie entre 10 et 20 tonnes, alors qu'en Europe, son utilisation est limitée à moins de dix tonnes, puisque l'Union européenne considère cette substance comme cancérigène, elle fait donc partie d'une liste restreinte (Commission européenne, s.d.d, Llompart et al., 2013, US EPA, 2018c). Au Canada, l'importation et la production annuelles de ce composé se situent entre une et 1 000 tonnes (OCDE, 2011).

Une étude de 1989 démontre que le musc cétone se dégrade peu en milieu aqueux. En effet, l'étude de Calame et Ronchi présente un taux de dégradation de 0 % après 28 jours de traitement à l'aide d'une boue activée de 100 mg/L avec une concentration du musc cétone de 34 mg/L. De plus, une demande biochimique en oxygène (DBO₅) de 135 mg O₂/g a également été déterminée, lors de cette étude, confirmant la faible biodégradabilité de la substance. (Calame et Ronchi, 1989, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p. 12) Ces résultats sont confirmés par des données de modèles prédictifs, lesquels estiment des temps de demi-vie de 60 jours en milieu aquatique, entre 60 et 120 jours dans les sols, 542 jours dans les sédiments et 8,929 jours dans l'air (OCDE, 2011).

Cette substance, d'une masse molaire de 294,307 g/mol, est utilisée dans plusieurs produits de soins corporels. En effet, une étude de Roosens et al. (2007) présente des concentrations de 0,057, 0,030 et 0,013 µg de musc cétone par kilogramme de produit dans les déodorants, les produits pour les cheveux et les produits nettoyants. Une concentration de 6,21 µg/kg de musc cétone a également été déterminée dans les gels capillaires (Llompart et al., 2013). Certaines études rapportent aussi la présence de cette substance dans les stations de traitement des eaux usées et dans les milieux aquatiques. En effet, une étude canadienne de Yang et al. (2006) a mesuré des concentrations entre 0,013 et 0,016 µg/L dans les affluents et de 0,085 µg/L dans les effluents des systèmes de traitement des eaux usées.

Tableau 3.5 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel est un ion ammonium (inspiré de Kim et al., 2016)

Nom commun				
<p>Musc cétone</p> <p>2-acetyl-5-tert-butyl-4,6-dinitro-1,3-diméthylbenzène;</p> <p>3,5-dinitro-4-t-butyl-2,6-diméthylacétophenone</p> <p>(CAS 81-14-1)</p>	<p>Musc xylène</p> <p>2,4,6-trinitro-1,3-dimethyl-5-tert-butylbenzene</p> <p>(CAS 81-15-2)</p>	<p>Musc ambrette</p> <p>6-tert-butyl-3-méthyl-2,4-dinitroanisole</p> <p>1-(1,1-diméthyléthyl)-2-méthoxy-4-méthyl-3,5-dinitro-benzène;</p> <p>(CAS 83-66-9)</p>	<p>Moscène</p> <p>1,1,3,3,5-pentaméthyl-4,6-dinitro-2H-indène</p> <p>(CAS 116-66-5)</p>	<p>Musc tibetène</p> <p>1-tert-butyl-2,6-dinitro-3,4,5-triméthylbenzène</p> <p>5-t-butyl-4,6-dinitro-1,2,3-triméthylbenzène</p> <p>(CAS 145-39-1)</p>
				

Aux États-Unis, une étude réalisée en Ohio évalue des concentrations à 0,569 et 0,099 µg/L dans les affluents et les effluents municipaux (Simonich et al., 2000). Une concentration maximale de 71,6 µg/kg a été mesurée dans les boues d'un système de traitement municipal ontarien (Yang et Metcalfe, 2006). Des études chinoises concluent également à la présence du musc cétone dans des eaux de surface et dans des eaux souterraines à des concentrations de 0,000 19 et 0,035 µg/L (Hu, Shi et Cai, 2011, Lv, Yuan, Hu et Wang, 2009). En France, des concentrations ont été détectées entre 0,209 et 1,304 µg/L dans des eaux souterraines. Enfin, à San Francisco, des concentrations dans les sédiments de la baie ont été mesurées entre 0,064 et 0,093 µg/kg à partir de prélèvements issus de dix sites différents (Lopez, Ollivier, Togola, Baran et Ghestem, 2015, Rubinfeld et Luthy, 2008).

Selon une étude présentée dans l'évaluation de l'ECHA (2005), un FBC de 1 380 L/kg a été défini chez la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*), confirmant ainsi les données modélisées : FBC de 3,6 kg/kg chez le ver de terre (*Lumbriculus variegatus*) et un FBC de 4 227 L/kg et 81,3 L/kg chez le poisson (espèce non définie). Des log K_{oe}, K_{oc} et K_{sa} de 4,31, 3,39 et 8,6 provenant de données modélisées permettent aussi de conclure que le musc cétone est lipophile, donc se retrouvera davantage dans les sédiments que dans l'eau (OCDE, 2011).

Des études ont également évalué ses propriétés toxiques en milieu aquatique et dans les sols. En effet, une étude de toxicité aiguë chez le guppy (*Poecilia reticulata*), un poisson d'eau douce tropical, présente une CL₅₀ supérieure à 385 µg/L. Le même paramètre a été analysé avec la daphnie (*Daphnia magna*), laquelle révèle des effets létaux (CL₅₀ et CL₁₀₀) à une concentration supérieure à 432 µg/L (Calame et Ronchi, 1989, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.32). Une CL₅₀ de 620 µg/L pour la daphnie a été mesurée par Schramm et al. (1996) appuyant l'étude présentée par l'ECHA. Grützner et al. (1995a, b, 1996, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.30-32) a aussi produit, des études de toxicité chronique de 21 jours, lesquelles démontrent des effets sur la mobilité et la reproduction des daphnies (*Daphnia magna*) à des concentrations de 680 µg/L (CE₅₀ mobilité), 340 µg/L (CE₅₀) et 170 µg/L (CSEO reproduction). L'équipe de Grützner et al. (1995) ont également observé les effets du musc cétone après une exposition de 21 jours chez des truites arc-en-ciel, lesquelles démontrent une CL₅₀ de 500 µg/L, une CSEO de 63 µg/L et une CMEO de 130 µg/L. Dans le sol, une étude, de 28 jours, indique que le musc cétone a des effets sur la production de l'arthropode *Folsomia candida* à des concentrations supérieures à 1 000 000 µg/kg pour la CL₅₀, 10 mg/kg pour la CSEO et 316 000 µg/kg pour le CMEO (reproduction) démontrent que la substance s'avère peu toxique pour cette espèce édaphique (Klepka et Petto, 1997).

La revue littéraire a ainsi permis de présenter les données expérimentales et modélisées disponibles pour cette substance. De plus, le Canada émet que le musc cétone ne présente aucun danger pour l'environnement selon l'évaluation préalable des muscs nitrés et au sens de la catégorisation canadienne de la LIS, cette

fragrance est classée comme persistante et toxique pour l'environnement (Environnement et changement climatique Canada et Santé Canada, 2018, Environnement et ressources naturelles Canada, 2006l).

3.2.4 Le musc xylène (CAS 81-15-2)

Le 1-tert-butyl-3, 5-diméthyl-2,4, 6-trinitrobenzène ou musc xylène est une substance de 296,267 g/mol qui, tout comme le musc cétone, est restreinte en Europe pour son caractère cancérigène (Commission européenne, s.d. e). Son utilisation est évaluée à moins de 100 tonnes aux États-Unis (Llompарт et al., 2013). Plus connue sous son nom générique musc xylène, cette substance est synthétisée à partir de l'alkylation du m-xylène et d'une nitrification avec de l'acide sulfurique (Surburg et Panten, 2016). Au Canada, le volume de production et d'importation de ce composé se situe annuellement entre 1 et 1 000 T (OCDE, 2011).

Selon Calame et Ronchie (1989, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.11), le musc xylène ne se dégrade pas en milieu aquatique. En effet, un taux de dégradation de 0 % a été mesuré par deux études. Des données modélisées par les modèles informatiques EPI Suite™ et TOPKAT prédisent des temps de demi-vie de 182 jours dans l'eau, entre 180 et 360 jours dans le sol, de 1 620 jours dans les sédiments et de 13 jours dans l'air (OCDE, 2011).

Tout comme le musc cétone, le musc xylène se retrouve dans les gels pour les cheveux à des concentrations entre 212 et 299 000 µg/kg, dans les déodorants à une concentration de 79 µg/kg, dans les lotions pour le corps à une concentration de 13 000 µg/kg et dans les produits sanitaires comme des détergents, dégraissants et liquides à vaisselle à une concentration de 40 µg/kg (Llompарт et al., 2013, Roosens et al., 2007). Son utilisation dans plusieurs produits populaires fait en sorte que cette substance est détectée dans des usines de traitements des eaux usées canadiennes à des concentrations entre 0,009 et 0,011 µg/L dans les affluents et entre 0,004 et 0,008 µg/L dans les effluents. Une concentration maximale de 133 µg/kg a également été observée dans de la boue d'une station de traitement d'eaux usées canadienne (Yang et Metcalfe, 2006). Aux États-Unis, le musc xylène a été détecté à des concentrations entre 0,376 et 0,399 µg/L et 0,031 et 0,230 µg/L dans des affluents et des effluents municipaux d'une station de traitement municipale de l'Ohio. (Simonich et al., 2000) De plus, une teneur de 0,000 1 µg/L a été observée dans le lac Michigan (Peck et Hornbuckle, 2004). En France, une étude réalisée par Lopez et al. (2015) démontre la présence de cette molécule dans les eaux souterraines avec des concentrations entre 0,400 et 0,475 µg/L.

L'utilisation de cette substance peut représenter un danger pour l'environnement en raison de sa propriété à persister dans l'environnement et à se bioaccumuler. En effet, selon une étude de Rudio (1996) et une prédiction du modèle informatique KOWWIN™, le musc xylène possède un log K_{oc} de 4,53 (OCDE, 2011). Des données modélisées présentent également un log K_{oc} de 4,53 et un log K_{sa} de 9,1 (Homem et al., 2015). Une étude réalisée par Gatermann (2002) détermine aussi le facteur de bioconcentration de cette substance pour sept espèces aquatiques. Ainsi, des FBC ont été mesurés entre 290 et 7 500 L/kg pour cinq espèces de

poissons, soit la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*), le rotangle (*Scardinius erythrophthalmus*), la tanche (*tinca tinca*), la carpe à la lune (*Carassius carassius*) et pour une autre espèce non identifiée. L'article fait état d'un FBC pour la moule zébrée (*Dreissena polymorpha*) et l'anguille d'Europe (*Anguilla anguilla*) à 1 800 et 40 000 L/kg. (Gatermann et al., 2002) Le crapet arlequin (*Lepomis macrochirus*), plus observé dans le lit des rivières, présente également un FBC entre 4 200 et 5 100 L/kg (Kuhlmann, 2005, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.15). Pour les espèces vivant dans les sols et les sédiments comme le ver de terre (*Lumbriculus variegatus*) et le xénope lisse (*Xenopus laevis*), des FBC respectifs de 4,6 kg/kg et 5 030 L/kg ont été déterminés de façon expérimentale (Calame et Ronchi, 1989, Schramm et al., 1996).

Différentes études présentent les effets toxiques du musc xylène pour les espèces aquatiques. En effet, Schramm et al. (1996) ainsi que Hugh et Krishnawami (1985, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.32) démontrent qu'une concentration supérieure à 150 µg/L cause des effets de toxicité aiguë après 72 h d'exposition, et qu'après 5 jours, une CSEO de 560 µg/L est observée chez l'algue *Scenedesmus subspicatus*. Hugh et Krishnawami (1985, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.33) ont également déterminé qu'une concentration supérieure à 1 000 µg/L serait nécessaire pour causer un effet de toxicité chez la cyanobactérie *Mycrocystus aeruginosa*. Des essais réalisés avec la daphnie (*Daphnia magna*) ont indiqué qu'une concentration de 320 µg/L engendre des effets sur la mobilité (comportement relatif à sa nage) après 48 h d'exposition. Une exposition chronique présente également une CL₅₀ et CSEO pour la reproduction à 6 800 µg/L et 56,0 µg/L (Hughes et Krishnaswamin, 1985, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.33). Chez les différentes espèces de poisson, une CL₅₀ de 1 200 µg/L a été démontrée chez le crapet arlequin (*Lepomis macrochirus*) et chez la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*), alors qu'une CL₅₀ de 200 µg/L a été déterminée chez le poisson-zèbre (*Danio rerio*) après 96 h d'exposition (ECHA, 1995, Boleas, Fernandez et Tarazona, 1996, Sousa et Suprenant, 1984, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.33). Enfin, une étude réalisée sur 14 jours démontre une CL₅₀ de 400 µg/L et une CMEO relative à la croissance des poissons-zèbres (*Brachydanio rerio*) à 100 µg/L (Adema et Langerwerf, 1985, citation secondaire, dans le texte d'ECHA, 2005, p.32).

En somme, le musc xylène possède plusieurs études expérimentales sur ses propriétés environnementales. De plus, le Canada a émis que le musc xylène ne présente aucun danger pour l'environnement selon l'évaluation préalable des muscs nitrés et selon la catégorisation canadienne de la LIS le musc xylène est évalué comme persistant, non bioaccumulable et non toxique (Environnement et changement climatique Canada et Santé Canada, 2018 Environnement et ressources naturelles Canada, 2006m).

3.2.5 Le musc ambrette (CAS 83-66-9)

La molécule 4-ter-buthyl-2, 6-dinitro-3-méthoxytoluène ou musc ambrette est un composé banni depuis 1995 au Canada et dans les pays membres de l'Union européenne (Llompart et al., 2013, Rowe et al., 2015,

Santé Canada, 2018). Son interdiction est principalement due à son impact pour la santé humaine. Il a été démontré que le musc ambrette est neurotoxique et cause une atrophie testiculaire chez les rats (Butte, Schmidt et Schmidt, 1999). Plusieurs étapes de méthylation et de nitrification sont requises pour produire cette substance sans toutefois obtenir un bon rendement (Surburg et Panten, 2016).

Bien que cette fragrance soit bannie dans certains pays, peu d'informations expérimentales sont disponibles pour estimer la persistance de cette molécule dans l'environnement. En effet, les gouvernements australien, canadien et européen présentent seulement des données modélisées. Ainsi, des temps de demi-vie de 60 jours, 120 jours, 542 jours et 7,12 jours ont été estimés dans l'eau, le sol, les sédiments et l'air. (Homem et al., 2015, National Industrial Chemicals Notification and Assessment Scheme [NICNAS], 2018, OCDE, 2011)

En 2013, une étude espagnole sur les compositions des fragrances présente une concentration de 419 µg/kg dans des exfoliants pour le corps (Llompарт et al., 2013). Dans l'environnement, des concentrations inférieures à 0,010 µg/L ont été détectées dans les eaux de surface et les effluents de traitements municipaux, et ce, dans plusieurs pays comme l'Espagne, la France et les États-Unis (Butte et al., 1999, Cavaleiro, Prieto, Monperrus, Etxebarria et Zuloaga, 2013, Osemwengie et Steinberg, 2001). Dans certaines de ces études, la concentration en musc ambrette est inférieure à la limite de détection de la méthode.

Tout comme pour les informations sur ses propriétés de dégradation, peu de données expérimentales sont disponibles concernant son potentiel de bioaccumulation. Des modèles prédictifs ont permis d'estimer un FBC entre 324 et 3 020 L/kg. Des log K_{oe}, K_{oc} et K_{sa} de 4,17, 3,4 et 6,0 ont aussi été prédits par ce type de modèles (Homem et al., 2015, OCDE, 2011).

Une étude expérimentale réalisée par Schramm (1996) indique que le musc ambrette peut avoir des effets sur le comportement des daphnies de l'espèce *Daphnia magna*. Cette étude démontre une CE₅₀ de 620 µg/L pour la mobilité des daphnies. Cette même étude a également tenté de présenter les effets du musc ambrette sur l'inhibition de croissance de l'algue *Scenedesmus subspicatus*, cependant, aucun effet n'a pu être déterminé pour cette espèce, même avec les plus fortes concentrations évaluées. (Schramm et al., 1996)

Malgré la faible disponibilité de résultats expérimentaux, des données modélisées permettent de déterminer les propriétés environnementales du musc ambrette. Selon la catégorisation de la LIS, le gouvernement canadien a identifié cette substance comme persistante, bioaccumulable et toxique à l'aide des critères de catégorisation indiqués dans le tableau 2.4 (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006n).

3.2.6 Le moscène (CAS 116-66-5)

Le 1,1, 3,3, 5-pentaméthyl-4, 6-dinitro-2H-indène aussi nommé moscène ou musc moscène est une substance de la catégorie des muscs nitroaromatiques dont la synthèse est constituée d'étapes de méthylation

et de nitrification du m-xylène (Rowe et al., 2015). Il est produit ou importé annuellement au Canada à des volumes plus petits que 100 kilogrammes (Llompart et al., 2013). Bien que son utilisation soit acceptée au Canada, ce n'est pas le cas partout. En effet, l'Union européenne a interdit, il y a quelques années, la présence de cette substance dans les produits cosmétiques (NICNAS, 2018). Le Canada précise toutefois que si la production de ce composé dépasse les 100 kilogrammes par année, des évaluations supplémentaires seront réalisées (Santé Canada, 2018).

Actuellement, aucune étude expérimentale ne présente les propriétés de dégradation de cette molécule (NICNAS, 2018). Des données modélisées par logiciel estiment la fragrance comme peu dégradable avec une probabilité de dégradation à 0,028 %. De plus, des temps de demi-vie de 60 jours et 120 jours dans l'eau et le sol ont été prédits. Des temps de demi-vie de 7,12 jours et 1621 jours ont également été modélisés dans l'air et les sédiments. (Homem et al., 2015, OCDE, 2011)

Sa faible production suggère que cette substance se retrouve dans peu de produits. En effet, selon Sanchez (Sanchez-Prado, Llompart, Lamas, Garcia-Jares et Lores, 2011), ce produit se retrouverait à une concentration maximale de 0,1164 % (masse/volume). Bien que ce produit soit interdit en Europe, des concentrations ont été retrouvées dans des eaux de stations de traitement d'Espagne, lesquelles présentent des teneurs en musc ambrette entre 0,159 et 1,18 µg/L dans l'affluent et entre 0,137 et 0,221 µg/L dans l'effluent des stations d'épuration (Vallecillos, Pocurull et Borrull, 2012). Aux États-Unis, la substance ne semble pas avoir été détectée dans les milieux naturels et dans les systèmes d'eau de traitement (Osemwengie et Steinberg, 2001). L'absence de cette molécule dans les eaux de surface est soutenue par l'interdiction d'utiliser ce composé dans les fragrances (IFRA, 2010).

Bien que peu démontré à l'aide d'études expérimentales, le musc muscène présente des données modélisées qui confirment son caractère bioaccumulable. En effet, un log K_{oe} de 5,39, un log K_{oc} de 4,3 et un log K_{sa} de 7,4 présentent, pour Homem et al. (2015), la molécule comme une substance bioaccumulable (OCDE, 2011). De plus, un FBC évalué chez le poisson (espèce non définie) de 1 300 L/kg a été présenté par Lyman et al. (1990, citation secondaire, dans le texte de Schramm, 1996, p.3).

Du point de vue toxique, seule l'étude réalisée par Schramm (1996) a cherché à évaluer l'effet du musc muscène sur des espèces aquatiques. Cette étude démontre qu'à une concentration entre 40 et 80 µg/L, aucun effet n'a été observé sur la mobilité de *Daphnia magna* et l'inhibition de croissance de *Scenedesmus subspicatus* (Schramm et al., 1996). Des données prédites par le modèle informatique EPI Suite™ Software indiquent des effets sur les poissons, les daphnies, les algues et les vers de terre (espèces et effets observés non décrits) à des concentrations respectives de 29,0, 37,0, 229 et 215 000 µg/L (Homem et al., 2015). D'autres modèles proposent des concentrations létales chez les poissons entre 4,17 et 1 840 µg/L et une CL_{50} de 13 600 µg/L chez la daphnie (OCDE, 2011)

En somme, il existe des données expérimentales et modélisées sur ses propriétés environnementales et sur la présence dans l'environnement du musc moscène. La catégorisation émise par le gouvernement canadien présente cette substance comme répondant à leurs critères en ce qui concerne la persistance, la bioaccumulation et la toxicité dans l'environnement.

3.2.7 Le musc tibétène (CAS 145-39-1)

Tout comme le musc ambrette, le 1-tert-butyl-2, 6-dinitro-3, 4,5-triméthylbenzène ou musc tibétène est fabriqué à l'aide des mêmes réactions que les autres muscs nitroaromatiques, soit par l'alkylation du m-xylène suivi de réaction de méthylation et de nitrification (Osemwengie et Steinberg, 2001). Ce musc ne peut être utilisé dans les cosmétiques au Canada et dans plusieurs pays européens (Environnement Canada et Santé Canada, 2013, Llompарт et al., 2013). En conséquence, aucun volume de production ou d'importation n'a été trouvé pour cette substance.

Tout comme le musc ambrette et le musc moscène, il existe peu d'information expérimentale sur cette fragrance concernant ses propriétés biodégradables. Une donnée prédite à l'aide d'un modèle mathématique estime le FBC de cette molécule à 1 090 L/kg (IFRA, 2010). Des données modélisées par logiciel présentent des temps de demi-vie de 180, 360, 542 jours et 6,08 jours dans l'eau, le sol, les sédiments et l'air (NICNAS, 2018, OCDE, 2011).

Le fait que cette substance, d'une masse molaire de 297,267 g/mol, soit interdite dans plusieurs pays peut expliquer sa faible concentration dans l'environnement. Des études européennes et américaines confirment son absence dans les systèmes de traitement des effluents et les milieux naturels (Sanchez-Prado et al., 2011, Vallecillos et al., 2012, Vallecillos, Pocurull et Borrull, 2013).

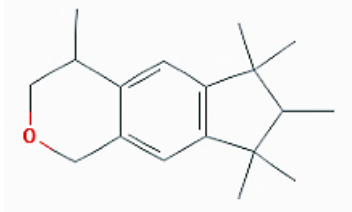
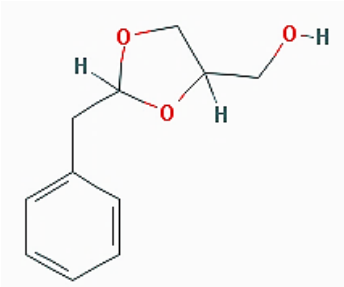
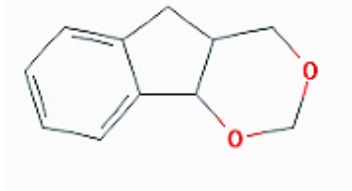
Des données modélisées démontrent le caractère lipophile de cette substance en prédisant un log K_{oe} de 5,18, un log K_{oc} de 4,1 et un log K_{sa} de 4,5. De plus, ces données estiment que cette molécule s'avère moyennement bioaccumulable en raison de son facteur de bioconcentration entre 1 215 et 23 175 L/kg. (NICNAS, 2018, OCDE, 2011)

Aucune étude expérimentale ne permet de conclure avec certitude que le musc tibétène a un effet sur les espèces aquatiques. Cependant, l'étude réalisée par Schramm (1996) permet d'identifier qu'une concentration supérieure à 790 µg/L est requise pour produire un effet sur l'inhibition de croissance de *Scenedesmus subspicatus* et sur la mobilité de la *Daphnia magna*. Des données modélisées proposent également que le musc tibétène cause des effets létaux (CL_{50}) chez les poissons avec des concentrations entre 6,08 et 2 010 µg/L, alors que chez la daphnie, l'algue et le ver de terre des concentrations de 51,0 mg/L (CE_{50}), 293 mg/L (CE_{50}) et 217 000 mg/L (CE_{50}) sont estimées. (Homem et al., 2015, OCDE, 2011) Les différentes études disponibles présentent seulement des données modélisées. Selon la catégorisation de la

LIS, le musc tibétène répond aux critères de catégorisation canadiens (Environnement et ressources naturelles Canada, 2008).

Le quatrième groupe fonctionnel présenté dans cette section est constitué de substances qui possèdent une fonction éther cyclique. Ces trois substances sont présentées dans le tableau 3.6.

Tableau 3.6 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel principal est un éther cyclique
(inspiré de Kim et al., 2016)

Nom commun		
Galaxolide 4,6,6,7,8,8a-hexaméthyl- 1,3,4,6,7,8-hexahydro- cyclopentabenzopyran (HHCB) (CAS 1222-05-5)	Glycérylacétate de phénylacétaldéhyde (2-Benzyl-1,3-dioxolan-4-yl) méthanol (CAS 29895-73-6)	Indolétal 4,4a,5,9b-Tétrahydroindeno [1,2-d][1,3]dioxine (CAS 18096-62-3)
		

3.2.8 Le galaxolide (CAS 1222-05-5)

Le galaxolide ou le 4,6,6,7,8,8a-hexaméthyl-1,3,4,6,7,8-hexahydro-cyclopentabenzopyran (HHCB) est un composé à trois cycles ayant une masse molaire de 258,405 g/mol. Il est produit par réaction de Friedel-Craft entre le 1,1,2,3,3-pentaméthylindane et le 1,2-époxypropoane suivi de la fermeture de son troisième cycle par l'ajout du paraformaldéhyde et de l'acide carbonique anhydride (Surburg et Panten, 2016). Ce composé est également un musc polycyclique et est fortement utilisé dans l'industrie. En 2000, près de 1 500 tonnes ont été produites en Europe (HERA, 2004). Encore aujourd'hui, le Canada produit et importe annuellement entre une et 1 000 tonnes de cette substance (OCDE, 2011).

Certaines études expérimentales présentent la biodégradabilité de ce composé dans différentes matrices. Un temps de demi-vie de moins d'une journée dans l'air a été établi, alors qu'une autre étude présente un temps de demi-vie à 4,54 jours dans l'eau (Aschmann, Arey, Atkinson et Simonich, 2001, HERA, 2004). Cette donnée est nettement plus faible que la valeur modélisée présentée par Homem et al., soit un temps de demi-vie dans l'eau de 60 jours (Homem et al., 2015). En 1998, une étude de biodégradabilité américaine présente

des données de temps de demi-vie dans différents types de sols et dans un sédiment. Les résultats présentent un temps de demi-vie de 79 jours et une biodégradabilité de 96 % dans le sédiment. Au niveau des sols, des temps de demi-vie de 95, 105 et 239 jours ont été mesurés dans un sol agricole, un sol forestier et un sol artificiel enrichi avec une boue d'une station de traitement d'eau. Le taux de biodégradation dans l'eau, tout comme dans les sédiments, présente la molécule comme dégradable avec des pourcentages respectifs de 93 %, 73 % et 65 %. Des études de 1993 et de 1994 démontrent que l'HHCB ne peut être minéralisé après 28 jours et 56 jours dans un effluent d'égout. Ainsi, l'HHCB se dégrade différemment selon le milieu dans lequel il se trouve. (ECHA, 2008)

Des études ont également été réalisées pour déterminer la quantité de HHCB dans différentes matrices. Une étude canadienne, réalisée par Yang et Metcalfe (2006), démontre la présence d'HHCB dans des boues à des concentrations entre 5,770 et 7,900 µg/kg. D'autres études canadiennes démontrent des concentrations dans les eaux des stations de traitements municipaux entre 0,214 et 2,031 µg/L dans les affluents et entre 0,139 et 1,300 µg/L dans les effluents municipaux (Lishman et al., 2006, Ricking, Schwarzbauer, Hellou, Svenson et Zitko, 2003, Yang et Metcalfe, 2006). Des études américaines et chinoises présentent également des concentrations de galaxolide dans les eaux de surface et souterraines avec une concentration maximale de 1,300 µg/L détectée dans des eaux de surface américaines (Gatermann, 2002). Une concentration de 0,0249 µg/L a été mesurée dans des eaux souterraines chinoises. Cependant, plusieurs analyses dans ces études ont démontré l'absence de détection du composé dans les différents milieux naturels évalués. (Lv et al., 2009)

Des données modélisées par EPI Suite™ et KOWWIN™ proposent un log K_{oc} de 5,89 et 6,26 (Institut national de l'environnement industriel et des risques, 2010, OCDE, 2011). Ces valeurs modélisées sont cohérentes avec celles de l'US EPA qui propose un log K_{oc} de 5,90 (Institut national de l'environnement industriel et des risques, 2010). Le FBC a également été modélisé donnant des valeurs entre 3 548 L/kg et 7 080 L/kg (OCDE, 2011). De façon expérimentale, ces données ont été validées dans l'eau par une étude réalisée avec le poisson *Lepomis macrochirus* et avec une seconde espèce non précisée donnant des FBC de 1 590 L/kg et 3 240 L/kg. Des données expérimentales réalisées chez le ver de terre (*Lumbricina sp.*) présentent également la capacité de bioaccumulation du galaxolide avec un FBC de 9 330 L/kg. La bioconcentration de ce composé chez des espèces vivant à proximité des sédiments a permis d'identifier des FBC de 288 L/kg pour *Anguilla anguilla*, de 20 L/kg pour *Scardinius erythrophthalmus*, de 2 690 L/kg pour *Lubriculus variegatus* et de 617 L/kg pour *Dreissena polymorpha*. (Gatermann et al., 2002) Selon d'autres études, des log K_{oc} ont été mesurés entre 3,8 et 4,7 et le logarithme du coefficient de distribution (K_d) de HHCB se situe entre 1,78 et 4,13 (ECHA, 2008, HERA, 2004, Müller, Schmid et Schlatter, 1996).

Finalement, plusieurs études sur la toxicité aiguë et la toxicité chronique ont été réalisées pour cette substance. En milieu aquatique, une étude de 6 jours a observé une CSEO variant de 44 et 131 µg/L pour le développement du copépode *Arcatia tonsa* et une CSEO de 37 et 75 µg/L pour son développement larvaire. Cette même étude a également identifié une CL₅₀ de 470 µg/L après 48 h d'exposition au HHCB (Wollenberger, Breitholtz, Ole Kusk et Bengtsson, 2003). Van Dijk (1997, citation secondaire, dans le texte de Balk, 1999, p.83) a aussi évalué la toxicité relative à la croissance chez l'algue *Raphidocelis subcapitata*. Une CSEO de 201 µg/L et une CE₅₀ de 854 µg/L ont été mesurées après 72 h d'exposition. Des valeurs de toxicité chronique de 21 jours ont également été déterminées chez *Daphnia magna*, lesquelles présentent une CSEO pour la reproduction de 111 µg/L, une concentration d'inhibition (CI₅₀) de 293 µg/L pour la mobilité et une CE₅₀ pour la reproduction de 282 µg/L (Balk et Ford, 1999). Des paramètres similaires ont été évalués pour le crapet arlequin (*Lepomis macrochirus*), lequel est affecté par le HHCB après 21 jours d'exposition la CSEO relative à la croissance est de 182 µg/L et la CL₅₀ de 452 µg/L (Balk et Ford, 1999). Une étude chronique de 36 jours a été réalisée chez le mené à grosse tête (*Pimephales promelas*) dans laquelle une CSEO de 68 µg/L a été établie pour la croissance, la survie et le développement de la larve du poisson en présence d'HHCB, une CL₅₀ supérieure à 140 µg/L a également été définie (Van Dijk, 1997, dans le texte de Balk, 1999, p.83).

La toxicité de HHCB a également été mesurée dans des sédiments avec différentes espèces, après une exposition de 28 jours. L'HHCB ne semble pas influencer l'émergence de *chironomus riparius* avec une CSEO de 200 000 µg/kg et des CE₁₅ et CE₅₀ de 259 000 et 409 000 µg/kg. La croissance de *Hyaella azteca* est caractérisée par une CSEO de 7 100 µg/kg et des CE₁₅ et CE₅₀ de 34 800 et 53 500 µg/kg. Dans cette étude, le *Lumbriculus variegatus* a été utilisé pour évaluer les effets du HHCB sur la reproduction et sur le développement de la population. Ainsi, une CSEO de 16 200, une CE₁₅ de 24 100 et une CE₅₀ de 74 100 µg/kg ont été mesurées chez le ver de terre. Pour le développement de la population, une CSEO de 60 900, une CE₁₅ de 62 400 et une CE₅₀ de 97 700 µg/kg ont été établies. Finalement, une CL₅₀ de plus de 140 000 µg/kg de HHCB a été mesurée à l'aide du *Lumbriculus variegatus*. (ECHA, 2008)

L'ECHA présente les études de Gossmann et Klepta qui ont évalué la toxicité du HHCB dans un sol artificiel avec *Eisenia fetida* et *Folsomia candida* pour déterminer les effets sur la croissance, la reproduction et la mortalité causée par HHCB. Les résultats de ces études démontrent que pour *Eisenia fetida*, la CSEO relative à la mortalité après 56 jours correspond à 45 500 µg/kg, alors qu'après 28 jours une CSEO de plus de 250 000 µg/kg est identifiée. Une CSEO pour la croissance de 105 000 µg/kg a également été mesurée selon cette étude. Les résultats pour *Folsomia candida* sont très semblables aux valeurs du ver *Eisenia fetida*, soit une CSEO de 45 000 µg/kg et une CSEO de 105 000 mg/kg. (ECHA, 2008)

En résumé, différentes études présentent des données expérimentales et modélisées sur les propriétés environnementales du galaxolide et sa présence dans l'environnement. De plus, selon les critères de la LIS, le galaxolide est peu dangereux pour l'environnement (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006c).

3.2.9 Le glycérylacétale de phénylacétaldéhyde (CAS 29895-73-6)

Le (2-benzyl-1,3-dioxolan-4-yl) méthanol ou glycérylacétale de phénylacétaldéhyde est une substance produite par l'acétalisation du phénylacétaldéhyde avec de la glycérine (Climent, Corma et Velty, 2004, Surburg et Panten, 2016). Selon les données canadiennes, la production de ce composé ne dépasse pas les 1 000 tonnes par année, alors que la production et l'importation européennes ne dépassent pas dix tonnes, annuellement (ECHA, 2017c, OCDE, 2011).

Une étude sur la demande biochimique en oxygène (DBO), réalisée avec une eau de rivière des Pays-Bas, présente une dégradation de 48 % du glycérylacétale de phénylacétaldéhyde après 28 jours et de 71 % après 60 jours. Selon le guide 301D de l'OCDE, le test de DBO conclut que la substance est classée comme non persistante, puisque le taux de dégradation est supérieur 60 % après 60 jours. Une seconde étude, réalisée avec les boues d'une station d'épuration avec traitement biologique de Genève en Suisse, classe la molécule comme rapidement biodégradable selon le guide 301F de l'OCDE (ready biodegradability : Manometric respirometry test). Une dégradation supérieure à 60 % a été mesurée après 28 jours, soit 71 %, à partir d'une concentration de matières en suspension de la boue à 30 mg (poids sec)/L. (ECHA, 2017c) De plus, des mesures évaluées par RQSA estiment le temps de demi-vie du glycérylacétale de phénylacétaldéhyde dans l'eau à 15 jours. Ainsi, il apparaît que cette substance est peu, voire non persistante, dans l'eau (OCDE, 2011).

Aucune donnée expérimentale sur la teneur environnementale, la bioaccumulation et la toxicité n'est disponible pour cette fragrance. Cependant, des données RQSA estiment un log K_{oc} de 1,31 et 0,7 un log K_{oc} de 2,03 et un FBC de 3,16 L/kg. (OCDE, 2011) Plusieurs logiciels de modélisation comme TOPKAT, Aster, ECOSAR™ et PNN ont également évalué les concentrations d'effets toxiques de cette substance. Chez le mené à grosse tête (*Pimephales promelas*) des CL_{50} variant de 37 560 à 6 502 369 µg/L ont été modélisées, alors que chez *Daphnia magna* des CE_{50} allant de 60 803 à 577 300 µg/L ont été modélisées sans toutefois préciser l'effet à l'étude. Des modélisations ont également porté sur les effets du glycérylacétale de phénylacétaldéhyde sur la reproduction de l'algue verte estimant un CE_{10} et un CE_{50} après 96 h de 29 910 et 123 490 µg/L respectivement. (ECHA, 2017c, OCDE, 2011)

Bien qu'il y ait peu de données expérimentales sur le glycérylacétale de phénylacétaldéhyde, des données modélisées permettent de présenter ses propriétés environnementales. Aucune information n'est toutefois disponible en ce qui concerne sa présence dans l'environnement. De plus, selon la LIS, cette molécule ne

répond pas aux critères du gouvernement canadien pour la catégorisation environnementale et pour la santé humaine. Elle est donc non persistante, non bioaccumulable et non toxique selon les critères présentés dans le tableau 2.4. (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006f)

3.2.10 L'indolétal (CAS 18096-62-3)

L'éther cyclique 4,4a,5,9b-tetrahydroindeno(1,2-d)-1,3-dioxine ou indolétal est produit par la réaction de Prins à partir de l'indène et du formaldéhyde en milieu acide (Surburg et Panten, 2016). Très peu d'information est disponible dans la littérature pour ce composé présent dans les savons et les détergents (Vigon, 2005).

Des données produites par RQSA présentent cette molécule comme peu persistante avec un temps de demi-vie de 37,5 jours dans l'eau, mais persistante dans le sol et les sédiments avec des temps de demi-vie de 338 jours et 75 jours (Danish Environmental Protection Agency, 2016). Cependant, des études présentées par l'ECHA (2018a) démontrent plutôt que l'indolétal est un composé très peu dégradable en milieu aqueux. En effet, un temps de demi-vie de plus de 365 jours a été évalué à partir d'une expérimentation pour déterminer les effets de l'hydrolyse à différents pH. Cette expérimentation conclut que la substance s'hydrolyse peu à des pH de 4, 7 et 9. Un taux de dégradation de 5 % a également été mesuré lors d'une seconde étude de 28 jours. (ECHA, 2018a)

Aucune information n'est disponible concernant les concentrations de l'indolétal en milieu aquatique. Des données modélisées présentent la molécule comme peu bioaccumulable dans l'environnement avec un $\log K_{oc}$ de 1,91 et un $\log K_{oa}$ de 6,09. Un $\log K_{oc}$ de 2,30 L/kg et un FBC de 12,4 L/kg ont également été estimés par modélisation (US EPA, 2018a). Des données RQSA, présentées par le gouvernement canadien, confirment les données présentées par l'US EPA avec un FBC de 5,19 et un $\log K_{oc}$ de 1,84 (OCDE, 2011).

Quelques études expérimentales ont été réalisées pour évaluer les effets toxiques de la molécule. Une étude réalisée avec le poisson-zèbre (*Danio rerio*) présente une CL_{100} après 96 h de plus de 100 000 µg/L. Une étude sur la mobilité de l'indolétal avec la daphnie (*Daphnia magna*) conclut que la CE_{50} est supérieure à 94 900 µg/L. Finalement, une étude réalisée sur l'algue verte (*Raphidocelis subcapitata*) conclut que la CSEO (inhibition de croissance) et la CE_{50} (inhibition de croissance) dépassent 100 000 µg/L. Des informations sur la toxicité ont également été identifiées par méthodes mathématiques, lesquelles présentent des concentrations supérieures à 75 000 µg/L pour la CL_{50} chez le poisson, supérieures à 113 000 µg/L pour la CL_{50} chez la daphnie et supérieure à 202 000 µg/L pour la CE_{50} chez l'algue verte sans préciser l'espèce. (ECHA, 2018a)

En résumé, quelques données expérimentales sur les effets toxiques de l'indolétal sont disponibles dans la littérature, mais les propriétés environnementales sont davantage présentées par des données modélisées.

De son côté, le gouvernement canadien catégorise cette substance comme faiblement dangereux pour l'environnement (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006e).

Le dernier groupe présenté dans ce chapitre est les substances dont le groupement fonctionnel est une lactone. Ces substances, présentées dans le tableau 3.7, sont également considérées comme des macromolécules qui possèdent de grandes similitudes dans leur structure, ce qui se reflète dans leurs propriétés physico-chimiques. L'ensemble de ces données physico-chimiques est présenté à l'annexe 3.

3.2.11 Le cervolide (CAS 6707-60-4)

Le 12-oxahexadécanolide ou cervolide est un musc macrocyclique, d'une masse molaire de 256,386 g/mol, synthétisé à partir de la réaction entre le 1-méthyl-11-bromoundecanoate et le sel monosodique du 1,4-butanediol. Le résultat de cette réaction est ensuite condensé pour former un polyester qui sera dépolymérisé pour produire le cervolide. (Surburg et Panten, 2016) En 2008, la production de ce composé est principalement européenne avec un volume entre une et dix tonnes par an, tandis qu'en Amérique du Nord, sa production annuelle est évaluée à moins d'une tonne (Salvito et al., 2002).

Cette molécule est présentée comme rapidement biodégradable par l'Agence européenne. En effet, une étude de 1991, présentée par l'ECHA, démontre qu'après 28 jours dans un effluent traité par boue activée, le cervolide est presque complètement dégradé à 96,5 % (ECHA, 2017b). Cette donnée confirme les informations prédites par RQSA, lesquelles présentent un temps de demi-vie de 15 jours dans les sols et une oxydation atmosphérique par les radicaux libres d'hydroxyde ($\bullet\text{OH}$) de 0,3008 jour. Un temps de demi-vie beaucoup plus grand, soit 999 jours, a cependant été prédit par RQSA pour un processus d'oxydation avec l'ozone. (OCDE, 2011) Des temps de demi-vie ont également été estimés par RQSA, soit de 15 jours dans l'eau et le sol et de 135 jours dans les sédiments (Danish Environmental Protection Agency, 2016).

Malgré la faible production mondiale de ce composé, une étude espagnole a permis de déterminer la concentration du cervolide dans les eaux de systèmes de traitement des eaux usées et dans des boues d'épuration. En ce qui concerne les boues, une concentration maximale de 0,19 $\mu\text{g/kg}$ a été notée. Des concentrations entre 0,010 et 0,100 $\mu\text{g/L}$ et 0,010 et 0,040 $\mu\text{g/L}$ ont été observés dans les affluents et les effluents municipaux. (Vallecillos et al., 2012, 2013)

Seules des valeurs prédites sont disponibles concernant la capacité de bioaccumulation de ce composé. Ainsi, le modèle KOWWINTM prédit un log K_{oc} de 4,9, alors que le modèle BCFWINTM propose un FBC de 1 180 L/kg (OCDE, 2011). La faible quantité d'information concernant le cervolide peut provenir de sa biodégradabilité rapide observée précédemment ce qui peut suggérer que cette substance ne semble pas s'accumuler.

En ce qui concerne sa toxicité, deux études expérimentales ont permis de donner des informations sur ses effets sur la mobilité et la croissance d'espèces. La première étude, réalisée avec la daphnie (*Daphnia magna*), évalue la toxicité aiguë (mobilité) du composé après une exposition de 48 h. Les résultats obtenus présentent des concentrations ayant des effets pour 50 % et 100 % des organismes à 10 300 µg/L et à 16 000 µg/L. La deuxième étude, réalisée en 2017, présente les effets du cervolide sur la croissance des algues de l'espèce *Desmodesmus subspicatus*. Cette étude a permis de déterminer des CE₁₀ et CE₅₀ de 480 et 1 200 µg/L et une CSEO de 160 µg/L après une exposition de 72 h. (ECHA, 2017b)

Des résultats de modélisation prédisent une CE₅₀ de 0,094 µg/L pour l'organisme *Daphnia magna*, sans toutefois déterminer le paramètre de l'effet évalué. De plus, d'autres modèles prédisent des CL₅₀ entre 190 et 3 400 µg/L pour les poissons (aucune espèce spécifique). (OCDE, 2011)

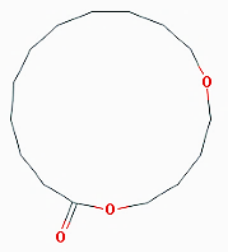
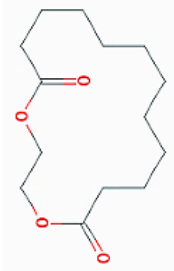
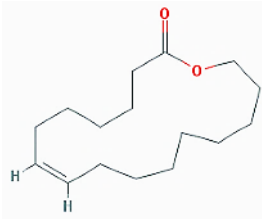
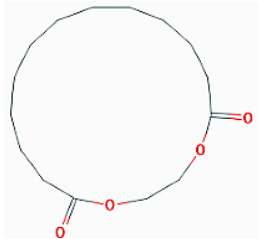
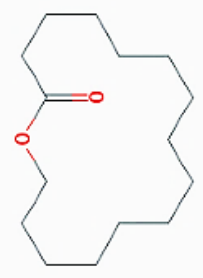
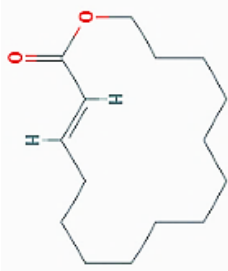
En somme, le cervolide a été caractérisé par des données expérimentales et modélisées qui présentent ses propriétés environnementales et sa présence dans l'environnement. De plus, cette substance est catégorisée par la LIS comme peu dangereuse pour l'environnement. (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006k).

3.2.12 Le zénolide (CAS 54982-83-1)

L'éthylène dodécanedioate également nommé zénolide, est une molécule macrocyclique d'une masse moléculaire de 256,342 g/mol. En 2008, sa production était entre 100 et 1 000 tonnes, et ce, autant en Europe qu'en Amérique du Nord (Api et al., 2017, OCDE, 2011, Salvito et al., 2002). Elle est synthétisée par la réaction de l'acide 1,12-dodécanedioïque et de l'éthylène glycol en présence d'un catalyseur, suivi d'une dépolymérisation du produit de la première réaction sous condition thermique (Surburg et Panten, 2016).

Selon des études de biodégradabilité, le zénolide est une substance rapidement dégradable en milieu aqueux. En effet, un taux de dégradation de la molécule de 100 % a été mesuré après 28 jours dans un effluent de traitement d'eau privé. Des taux de dégradation ont également été mesurés dans des eaux traitées à l'aide de boues activées, lesquels donnent des pourcentages par DBO et consommation totale de 73 % et 78 %. (ECHA, 2011b, Api et al., 2017) Des données prédites par RQSA présentent un temps de demi-vie de 15 jours dans l'eau et une oxydation atmosphérique par radicaux libres hydroxyde ($\bullet\text{OH}$) de 0,6816 jour. De plus, les temps de demi-vie dans les sols et les sédiments sont également prédits à 30 jours et 135 jours (Danish Environmental Protection Agency, 2016). L'oxydation par l'ozone a cependant été prédite avec une donnée plus importante, soit 999 jours, ce qui est invalidé par les données expérimentales présentées ci-dessus. (OCDE, 2011)

Tableau 3.7 Fragrances de type animal dont le groupement fonctionnel principal est une lactone (inspiré de Kim et al., 2016)

Noms communs					
<p>Cervolide</p> <p>12-Oxahexadécanolide</p> <p>1,6-dioxacycloheptadécán-7-one</p> <p>(CAS 6707-60-4)</p>	<p>Zénolide</p> <p>Éthylène dodécánedioate</p> <p>1,4-dioxacycloheptadécán - 5,16-dione</p> <p>(CAS 54982-83-1)</p>	<p>Ambrettolide</p> <p>(8Z)-Oxacycloheptadéc-8-èn-2-one</p> <p>hexadec-7-en-16-olide</p> <p>(CAS 123-69-3)</p>	<p>Éthylène brassylate</p> <p>acid 1,1-undecanedicarboxylique ester avec éthyléneglycol</p> <p>1,4-dioxa-5,17-cycloheptadecandione</p> <p>(CAS 105-95-3)</p>	<p>Exaltolide</p> <p>Pentadecalactone</p> <p>15-hydroxy-pentadecanoicacixi-lactone</p> <p>(CAS 106-02-5)</p>	<p>Globalide</p> <p>(3E)-1-Oxacyclohexadéc-3-èn-2-one</p> <p>Habanolide</p> <p>(CAS 34902-57-3)</p>
					

L'utilisation de cette substance dans des produits de soin corporel a permis à l'équipe de Vallecillos de détecter la concentration de cette molécule dans deux systèmes de traitement de l'eau et trois boues provenant de systèmes de traitement des eaux usées du nord-est de l'Espagne. Les résultats démontrent des concentrations entre 0,010 et 0,100 µg/L et 0,010 et 0,040 µg/L dans les affluents et les effluents des systèmes de traitement des eaux usées municipales, ainsi qu'une concentration maximale de 0,190 µg/kg dans les boues. (Vallecillos et al., 2012, 2013)

En 2012, une étude a été réalisée afin de déterminer les effets de bioaccumulation du zénolide chez la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*). Une étude de 33 jours, présentée par l'ECHA, démontre des facteurs de bioconcentration (FBC) de 179 et 203 L/kg pour des concentrations d'exposition de 2,3 et 29 µg/L de zénolide. (ECHA, 2011b) Des données obtenues par le modèle BCFWINTM estiment aussi un FBC de 355 L/kg. De plus, des données RQSA, suggèrent que la molécule pourrait être bioaccumulable avec des log de K_{oe} entre 2,87 et 4,22. (OCDE, 2011)

Du point de vue de la toxicité, trois études permettent d'identifier des concentrations qui ont des effets sur la croissance, la mobilité, le développement de la population et la mortalité de différentes espèces. La première étude évalue les effets du zénolide sur la mobilité de *Daphnia magna* après 48 h. Selon cette étude, le zénolide possède un effet sur la mobilité des daphnies avec une CE_{50} supérieure à 14 000 µg/L ce qui contredit la valeur prédite par RQSA de 0,248 µg/L. La seconde étude, réalisée avec l'algue *Raphidocelis subcapitata*, identifie les effets du zénolide sur l'inhibition de croissance après 72h en déterminant des CE_{50} de 17 000 µg/L et une CSEO de 610 µg/L. La troisième étude réalisée chez la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*) évalue la CL_{50} à 880 µg/L après 96 h. Cette donnée concorde avec celle prédite du modèle ECOSARTM qui propose une CL_{50} de 519 µg/L. Cependant, plusieurs autres modèles estiment des concentrations létales supérieures à celles obtenues chez la truite arc-en-ciel avec des concentrations supérieures à 2 500 µg/L. (ECHA, 2011b, Api et al., 2017)

Il est possible d'évaluer le danger associé à cette substance à l'aide des données expérimentales et modélisées disponibles dans la littérature. De plus, la catégorisation du gouvernement canadien présente cette molécule comme peu dangereuse pour l'environnement selon leurs critères (tableau 2.4) (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006i).

3.2.13 L'ambrettolide (CAS 123-69-3)

Le (8Z)-oxacycloheptadéc-8-èn-2-one ou ambrettolide fait partie de la famille des muscs macrocycliques et est synthétisé à partir de l'acide 9,10,16-trihydroxyhexadecanoïque en sept étapes successives (Surburg et Panten, 2016). Ce composé est principalement utilisé dans les savons et les lotions pour le corps. Une étude

japonaise présente des concentrations de 22 et 67 µg/g dans ce type de produits (Nakata, Hinosaaka et Yanagimoto, 2015).

Très peu de données environnementales sont disponibles dans la littérature concernant ses effets potentiels. Rainieri (Rainieri, Barranco, Primec et Langerholc, 2017) explique ce peu d'informations par les faibles concentrations utilisées qui sont généralement inférieures aux limites de détection des méthodes lors des processus de biodégradation. Des valeurs prédites par modèle RQSA présentent des données de persistance dans l'environnement avec un temps de demi-vie de 15 jours dans l'eau et de moins d'une journée dans l'air (OCDE, 2011). En ce qui concerne sa présence dans les sols et les sédiments le gouvernement danois (2016) et Homem et al. (2015) proposent un temps de demi-vie de 30 jours et 135 jours.

La substance a été retrouvée dans les eaux usées municipales et dans des boues d'épuration. En effet, Vallecillos a détecté une concentration d'ambrettolide de 0,025 à 0,85 µg/kg dans des boues, une concentration de 0,507 à 21,5 µg/L dans des affluents et de 4,021 µg/L dans des effluents municipaux d'Espagne. (Vallecillos et al., 2012, 2013)

Des valeurs prédites par RQSA présentent la substance comme potentiellement bioaccumulable. Des FBC de 30 900 et de 2740 L/kg ont été prédits par les modèles OASIS et BCFWIN™ (Danish Environmental Protection Agency, 2018). Un log K_{oe} a également été modélisé par KOWWIN™ proposant une valeur de 5,37 (OCDE, 2011). De leur côté, Homem et al. (2015) estiment des données prédites à partir du K_{oe}. Ainsi, des FBC pour le poisson, le ver de terre et la plante de 1620 L/kg, 2750 L/kg et 10 000 L/kg ont été proposés. Aucune donnée expérimentale n'a été trouvée pour confirmer ces informations.

Tout comme pour les données sur la bioaccumulation, aucune étude expérimentale n'a été trouvée chez les espèces aquatiques. Des données prédites par RQSA présentent des CL₅₀ chez le poisson (espèce non indiquée) entre 130 et 9 890 µg/L. Chez la daphnie (*Daphnia magna*), les différents modèles proposent une CE₅₀ de 0,094 2 µg/L ou une CE₅₀ après 48 h variant entre 412,3 et 5 860 µg/L (Danish Environmental Protection Agency, 2018, OCDE, 2011). Des estimations réalisées par Homem et al. (2015) présentent également des effets toxiques à des concentrations de 194, 150, 406 et 196 000 µg/L chez le poisson, la daphnie, les algues et les vers de terre.

Seules des données modélisées sont disponibles pour décrire les propriétés environnementales de l'ambrettolide, et ce, même si sa présence dans l'environnement a été indiquée dans l'étude espagnole de Vallecillos. Selon les critères utilisés par la LIS, le gouvernement canadien conclut que cette substance est susceptible d'être bioaccumulable et toxique (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006d).

3.2.14 L'éthylène brassylate (CAS 105-95-3)

L'éthylène brassylate ou le musc T est une substance macrocyclique ayant une masse molaire de 270,369 g/mol, qui se retrouve dans les produits de consommation depuis le début du 20^e siècle. En 1974, des concentrations maximales de 0,3, 0,015 et 0,1 % (m/m) ont été retrouvées dans les savons, les détergents et les crèmes pour le corps (Opdyke, 1975). Cette substance est produite par la réaction du cyclododécanone avec le carbonate de diméthyle. Le méthyl-2-oxocyclododecylcarbonxylate généré par cette réaction est ensuite introduit en condition alcaline pour former l'éthylène brassylate. La substance peut être aussi synthétisée par l'oxydation du n-tridécanne avec le champignon *Candida tropicalis*. (Surburg et Panten, 2016). Son utilisation au Canada est estimée entre une et 1 000 tonnes par année (OCDE, 2011)

Peu de données expérimentales concernant sa capacité de biodégradation sont disponibles. En effet, une seule étude expérimentale, réalisée aux Pays-Bas, démontre une biodégradation de plus de 99 % de la substance dans une eau contenant 3,3 g/L de matières en suspension provenant d'une boue de traitement des eaux usées municipales (ECHA, 2013a). Des données modélisées par Homem et al. montrent des temps de demi-vie de 15, 30 et 0,625 jours dans l'eau, le sol et l'air, alors que des données modélisées par RQSA donnent 15 jours dans le sol, 135 jours dans les sédiments et 999 jours dans un processus d'oxydation de la molécule par l'ozone et 0,6253 jour dans l'air (Homem et al., 2015, OCDE, 2011). L'ensemble de ces informations présente ainsi la substance comme peu persistante dans les différentes matrices, excepté pour la valeur de 999 jours concernant le processus d'oxydation de la molécule par l'ozone.

La présence de l'éthylène brassylate dans l'environnement a été évaluée par les études réalisées par Herren et al. (2000) et Osemwengie et al. (2001). En effet, dans l'étude d'Herren, une concentration de 0,100 µg/kg a été observée dans des boues de station de traitement, alors qu'une concentration de moins de 0,000 02 µg/L a été mesurée dans des effluents de systèmes de traitement des eaux usées américains. (Herren et Berset, 2000, Osemwengie et Steinberg, 2001)

Peu de données expérimentales sont disponibles concernant la bioaccumulation de cette substance dans l'environnement. Une étude a été réalisée pour déterminer le log K_{oc} , celui-ci était de 3,83 dans le sol (ECHA, 2013a). Des valeurs RQSA proposent des FBC entre 319 L/kg et 10 000 L/kg et un log K_{oe} de 4,71 (OCDE, 2011). Des estimations à partir du log K_{oe} ont également été déterminées par Homem et al. Ils présentent des FBC relatifs aux poissons, aux vers de terre et aux plantes de 597 L/kg, 616 L/kg et 202 000 L/kg sans préciser les espèces. Ces auteurs présentent également des valeurs estimées pour le log K_{oc} et le log K_{sa} de 2,85 et 6,1 (Homem et al., 2015). Pour l'ECHA, la valeur du log K_{oe} de 4,71 ne permet pas de considérer la substance comme bioaccumulable (ECHA, 2013a).

Les informations sur la toxicité de l'éthylène brassylate, tout comme les informations sur sa persistance et sa bioaccumulation proviennent principalement de données prédites par modèle. Toutefois, des données de

toxicité aiguë expérimentales ont été réalisées avec *Daphnia magna* et *Desmodesmus subspicatus*, lesquelles donnent des valeurs de CE₅₀ de 8 090 µg/L pour *Daphnia magna* après 48 h d'exposition et de 14 580 µg/L pour *Desmodesmus subspicatus* après 72 h d'exposition. Une CE₁₀ a également été évaluée à 10 350 µg/L pour *Desmodesmus subspicatus* après une exposition de 72 h. (ECHA, 2013a) Les CL₅₀ prédites par modèle RQSA sont entre 738 et 6 220 µg/L chez les poissons (aucune espèce précisée) et le CE₅₀ chez les daphnies est de 0,003 89 µg/L (OCDE, 2011). Homem et al. (2015) ont également établi des concentrations pour une toxicité chronique de 107, 1 116, 570 et 246 000 µg/L chez le poisson (CL₅₀), la daphnie (CE₅₀), l'algue (CE₅₀) et le ver de terre (CE₅₀) sans toutefois préciser l'espèce considérée.

En somme, les informations sur les propriétés environnementales proviennent principalement de données modélisées et la catégorisation de LIS présente cette substance comme peu dangereuse pour l'environnement. (Environnement et ressources naturelles Canada, 2006a).

3.2.15 L'exaltolide (CAS 106-02-5)

Le pentadécalactone aussi appelé l'exaltolide est considéré dans la catégorie des muscs macrocycliques et est énormément utilisé dans le domaine des fragrances. En effet, cette substance est un composé retrouvé dans les écrans solaires et les baumes pour les lèvres à des concentrations de 0,1 et 2,56 % (m/m). Au Canada et en Europe, l'exaltolide est importé et produit à des quantités entre une et dix tonnes annuellement, comparativement aux États-Unis où l'exaltolide est produit à des quantités entre 1 000 et 10 000 tonnes par an (Environnement et changement climatique Canada [ECC] et Santé Canada, 2018, OCDE, 2011).

La synthèse de cette substance varie beaucoup, puisque de façon simple il s'agit d'une expansion du cycle de carbone à partir du cyclododécanone. Parmi les réactions possibles, une méthode consiste à mettre en réaction le cyclododécanone avec le 1-propén-2-ol. Le résultat de cette réaction sera par la suite déshydraté en milieu acide pour former le 12-hydroperoxy-13-oxabicyclohexadecane. Une réaction d'addition est ensuite réalisée avec le peroxyde d'hydrogène. Le produit de cette réaction génère finalement l'exaltolide à la suite d'une réduction par processus thermique. (Surburg et Panten, 2016)

Ce composé, d'une masse moléculaire de 240,39 g/mol, se présente comme un composé faiblement persistant dans l'environnement. En effet, une étude européenne de 1995 conclut, à la suite d'un test DBO de 28 jours, que la molécule est rapidement biodégradable dans l'eau. Les résultats de cette étude démontrent qu'après 8 jours, le taux de dégradation est de 67 %, et, qu'après 28 jours, il est de 90 %. (ECHA, 2013b) Cette donnée confirme les résultats obtenus par modélisation par Homem et al. qui présentent des temps de demi-vie de 15 et 30 jours dans le sol, de 135 jours dans les sédiments et de moins d'une journée dans l'air (Arbulu et al., 2011, Homem et al., 2015). Un temps de demi-vie a cependant été prédit à 999 jours à la suite d'une oxydation atmosphérique par l'ozone (Arbulu et al., 2011).

Des études, réalisées en Europe de l'Ouest, démontrent la présence d'exaltolide dans des systèmes de traitement des eaux usées municipales et dans des eaux de surface. En effet, deux études réalisées par Vallecillos et al. (2016) démontrent une concentration maximale de 0,130 µg/kg dans les boues d'épuration et des concentrations maximales de 10,8 et 1,380 µg/L dans les affluents et les effluents des trois sites de traitements des eaux usées municipaux, du nord de l'Espagne. Ces données sont appuyées par une étude portugaise qui présente une concentration de 1,540 µg/L dans l'affluent du site de traitement de la ville de Parada (Maia, Portugal) et une concentration dans les eaux de surface de 0,100 µg/L dans la rivière Leça (Matosinhos, Portugal) (Homem, Alves, Alves et Santos, 2016). Une étude de 2017 évalue la concentration moyenne annuelle d'exaltolide de 1,7 µg/kg dans le sable de 23 plages de la côte ouest du Portugal (Ribeiro, Ramos, Homem et Santos, 2017).

Malgré la présence d'études sur la concentration d'exaltolide dans l'environnement, aucune information sur ses propriétés de bioaccumulation n'est disponible jusqu'à présent. Des prédictions modélisées par logiciels offrent des FBC de 598 L/kg, 3 070 L/kg, 10 900 L/kg et 64 600 L/kg, ce qui suggère que les facteurs de bioaccumulation puissent être supérieurs à 5 000 L/kg selon les résultats des deux derniers modèles (ECHA, 2013b, Arbulu et al., 2011). Homem et al. (2015) présentent également des données calculées à partir du log K_{oe} de l'exaltolide, lesquelles donnent des FBC de 5 333 L/kg et 17 000 L/kg pour les poissons et les vers de terre (aucune espèce spécifiée). De plus, ces modèles proposent un log K_{oc} de 3,68 et des log K_{oe} de 6.15 et 5.51 (Homem et al., 2015, OCDE, 2011). Ces données présentent donc la molécule comme possédant un potentiel lipophile très important.

Certaines études présentent également les effets toxiques de l'exaltolide sur différentes espèces aquatiques. L'une de ces études, qui a évalué ces effets sur le développement des œufs de menés à grosse tête (*Pimephales promelas*) pendant 33 jours, a conclu à une CSEO et une CMEO de 110 et 27,0 µg/L. Deux autres études de toxicité aiguë ont été réalisées avec *Daphnia magna* et *Desmodesmus subspicatus*. Dans le premier cas, l'étude visait à déterminer la concentration létale de l'exaltolide pour une exposition de 48 h. Au final, la concentration maximale utilisée (127 µg/L) ne permet pas d'identifier la concentration létale. Les auteurs concluent donc que la CL₅₀ est supérieure à 127 µg/L tout comme la CSEO. La seconde étude a été réalisée pour déterminer les effets sur l'inhibition de croissance de l'algue *Desmodesmus subspicatus*. Une CE₅₀ de 400 µg/L a été mesurée ainsi qu'une CE₁₀ de 200 µg/L. Un processus de *Read-across* a également permis de déterminer la CL₅₀ de la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*) à 803 µg/L (ECHA, 2013b). Afin de déterminer cette concentration, le processus de *Read-across* utilise les informations du globalide pour estimer la CL₅₀ de l'exaltolide. Des données RQSA proposent également des CL₅₀ pour certains poissons (espèce non spécifiée) à 140 et 26,1 µg/L. (Organisation de coopération et développement économique (OCDE, 2011) Les valeurs déterminées mathématiquement par Homem présentent également

des CL₅₀ chez le poisson à 37 µg/L ainsi que des CE₅₀ de 31 et 111 µg/L chez la daphnie et l'algue (Homem et al., 2015).

En résumé, les données expérimentales et modélisées permettent de présenter les propriétés environnementales et la présence de l'exaltolide dans l'environnement. De plus, le gouvernement européen présente la molécule comme non persistante, non bioaccumulable et non toxique pour l'environnement. Cette évaluation concorde avec le rapport émis par le gouvernement canadien sur les lactones et cétones macrocycliques, les ionones et les cyclohexanones, qui présente l'exaltolide comme une substance peu dangereuse pour l'environnement (Agence européenne des produits chimiques [ECHA], 2013b, Environnement et ressources naturelles Canada, 2006b).

3.2.16 Le globalide (CAS 34902-57-3)

Le (3E)-1-oxacyclohexadéc-3-èn-2-one ou globalide est un dérivé de l'exaltolide qui se synthétise par la décomposition de l'hydroperoxyde en présence d'un catalyseur de cuivre (Surburg et Panten, 2016). Sa concentration dans les produits de soins corporels reste inconnue. Toutefois, des concentrations de globalide ont été mesurées dans des boues d'épuration à des concentrations maximales de 0,000 5 µg/kg et dans des eaux usées provenant d'usines de traitement des eaux usées d'Espagne à des concentrations entre 0,015 et 1,600 µg/L dans l'affluent, et entre 0,200 et 0,500 µg/L dans l'effluent (Vallecillos et al., 2012, 2013).

À notre connaissance, aucune donnée expérimentale n'est disponible concernant la persistance et la bioaccumulation du globalide dans l'environnement. Il existe plusieurs valeurs prédites, dont celles provenant du modèle *EPI SuiteTM level III Fugacity* ou des temps de demi-vie de 0,274, 15, 30, et 135 jours dans l'air, l'eau, le sol et les sédiments ont été estimés (Danish Environmental Protection Agency, s.d.). Le logiciel *EPI SuiteTM AOPWIN* propose des données similaires suggérant une faible persistance dans l'air en prédisant des temps de demi-vie de 0,3736 et 1,007 jours (Danish Environmental Protection Agency, 2016). Ces données suggèrent que la molécule est oxydée en moins d'une journée par les radicaux libres hydroxydes (•OH) et par l'ozone présent dans l'air. De plus, les calculs de temps de demi-vie présentés par Homem et al. (2015) prédisent des temps de demi-vie de 0,274, 15 et 30 jours pour l'air, l'eau et le sol. Ces données ont été calculées à partir de la valeur du log K_{oe} (Homem et al., 2015).

Les données estimées par des modèles et mesurées par Homem et al. présentent aussi la molécule comme un composé potentiellement bioaccumulable. En effet, selon des modèles RQSA, le log K_{oe} proposé est de 4,88 ou 5,51, et le log K_{oe} varie avec des prédictions de 3,67 et 3,56 (Danish Environmental Protection Agency, s.d., Royal society of chemistry, s.d.). Différents facteurs de bioaccumulation ont également été estimés avec des valeurs de FBC entre 772 et 2 888 (Danish Environmental Protection Agency, s.d., Homem et al., 2015). Selon Homem (2015), les plantes sont le plus à risque d'accumuler le globalide avec un FBC de 85 100 L/kg.

Selon une étude expérimentale, réalisée dans une eau douce, une CL_{50} de 803 $\mu\text{g/L}$ a été mesurée chez la truite arc-en-ciel (*Oncorhynchus mykiss*) après une exposition de 96 heures (Agence européenne des produits chimiques [ECHA], 2011c). Ce résultat expérimental valide les informations du modèle EPI Suite™ COSAT qui estime une concentration létale à 506 $\mu\text{g/L}$, tout en contredisant une donnée proposée à 6 380 mg/L par la plateforme VEGA. Des données prédites par EPI Suite™ ECOSAR et DEMETRA chez *Daphnia magna* présentent également des CE_{50} de 375 $\mu\text{g/L}$ et une CE_{50} de 0,272 mg/L pour les algues. (Danish Environmental Protection Agency, s.d.) Cette dernière varie un peu des valeurs calculées par Homem et al. (2015), lesquelles proposent une CE_{50} de 839 $\mu\text{g/L}$.

En somme, des données expérimentales et modélisées sont disponibles sur les propriétés environnementales du globalide ainsi que sur sa présence dans l'environnement. Cependant, aucune évaluation n'a été réalisée par le gouvernement canadien (Environnement et ressources naturelles Canada, 1999).

4. EXERCICE DE PRIORISATION

Ce chapitre a comme objectif de réaliser un classement des différentes substances documentées dans le chapitre 3 afin d'orienter les besoins de développement de méthodes d'analyses, d'études écotoxicologiques ou de suivis environnementaux. Comme il a été observé dans le chapitre 3, l'information disponible est très variable d'une substance à l'autre ce qui ne permet pas de les analyser avec le même degré de précision. Cet exercice de priorisation a pour objectif de produire un classement de la liste des substances selon les informations disponibles et de porter également un regard critique sur l'outil en cours de développement au CEAEQ afin de bonifier le processus de classification.

4.1 Présentation de la démarche de priorisation

La démarche de priorisation fait partie d'un processus de classification que le CEAEQ souhaite mettre en place afin d'orienter les besoins d'acquisition des connaissances concernant les contaminants d'intérêt émergent, dont font partie les fragrances. Tout en classant les substances selon l'information disponible, cet outil permet aussi de déterminer les études à mettre en place pour compléter leur évaluation du danger environnemental. La figure 4.1 présente les différentes étapes de la démarche de priorisation et de l'acquisition de connaissance.

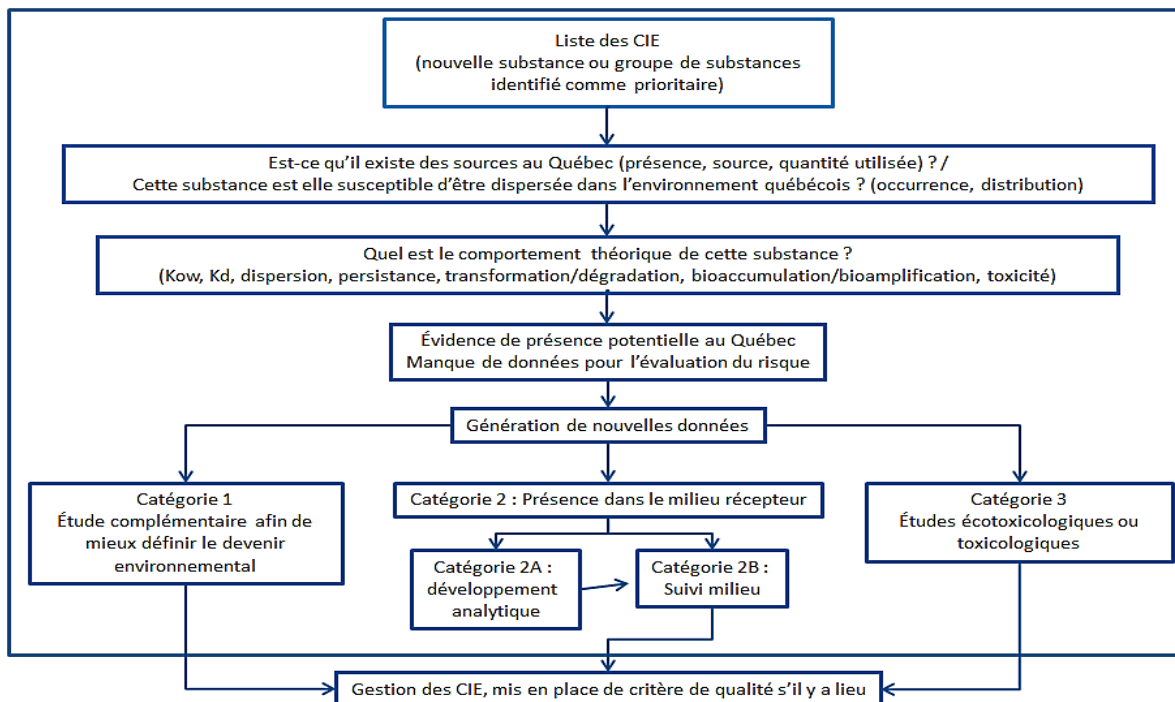


Figure 4.1 Processus d'acquisition et de classement de l'information du CEAEQ, (tiré de communication personnelle, 2018)

La première partie de la démarche consiste à établir la liste des substances ou les groupes de substance qui doivent être considérés comme prioritaires. Pour cette partie, les fragrances avaient été jugées prioritaires en raison du peu d'informations disponibles. Le chapitre 3 de cet essai a d'ailleurs permis de présenter la deuxième et la troisième parties de cette démarche, soit en identifiant l'occurrence, les sources et le comportement théorique des fragrances.

Les premières parties de la démarche plus théorique mènent à une classification pouvant orienter les besoins d'acquisition de nouvelles connaissances afin de compléter les informations manquantes selon trois catégories. La première catégorie propose de réaliser des études complémentaires sur le devenir de la molécule dans l'environnement comme des études de persistance ou encore de bioaccumulation. La deuxième catégorie indique le besoin de déterminer la présence ou non du composé dans le milieu récepteur et dans les organismes biologiques. Pour ce faire, il peut être nécessaire, dans un premier temps, de développer des méthodes d'analyses chimiques qui permettront de faire des suivis sur la molécule dans l'environnement. Ces suivis évaluent, par exemple, la concentration d'une substance dans le milieu récepteur pour ensuite vérifier si les concentrations observées peuvent avoir des effets toxiques sur les organismes du milieu. Finalement, l'absence de données ou une quantité d'informations limitées concernant les effets toxiques peut nécessiter la réalisation d'expérimentations supplémentaires. Ainsi, des études toxicologiques et écotoxicologiques permettent de compléter l'information nécessaire afin de réaliser une analyse de danger plus précise pour une substance donnée, et ainsi, contribuer à orienter les besoins de gestion, s'il y a lieu. Il faut noter qu'à chaque étape de la démarche, il est possible d'arrêter le processus selon le résultat.

4.2 Méthodologie de l'exercice de priorisation

Les fragrances ont été triées selon l'indice PBT/vPvB qui permet de catégoriser les composés en fonction des informations relatives à leur persistance (P), leur bioaccumulation (B) et leur toxicité (T). Une substance dont les données présentent des potentiels très importants de persistance ou de bioaccumulation est triée comme vPvB des termes anglais *very persistent* (vP) et *very bioaccumulative* (vB). (Gramatica, Cassani et Sangion, 2015) Différents critères sont d'ailleurs déterminés pour catégoriser ces données. Étant donné le peu d'information disponible sur les fragrances, l'évaluation des molécules a été réalisée à partir des critères les plus sévères pour chacun des milieux récepteurs (eau, sédiment, sol). Plus spécifiquement, les critères associés aux données dans l'eau correspondent à ceux proposé par l'US EPA en 2015 pour les nouveaux contaminants PBT et pour les temps de demi-vie. Pour les critères de persistance, de bioaccumulation et de toxicité, les critères du MDDELCC de 2013 définis pour les intrants de fracturation hydrique ont été utilisés. (MDDEFP, 2013, US EPA, 2012) Pour les matrices plus solides comme les sédiments et les sols, les critères

utilisés proviennent d'un profil d'évaluation portugais présenté dans l'article d'Homem et al. (2015). Le tableau 4.1 présente les critères associés aux différentes matrices.

Tableau 4.1 Critères utilisés pour l'évaluation des données (compilation d'après Homem et al., 2015, p. 3, MDDEFP, 2013, p.5, US EPA, 2012, p.7-3)

	Eau			Sédiment			Sol		
Persistance	N-P	P	T-P	N-P	P	T-P	N-P	P	T-P
Temps de demi-vie (jours)	< 60	≥ 60	≥ 180	< 60	≥ 60	≥ 180	< 60	≥ 60	≥ 180
% Dégradation	≥ 60	20-60	≤ 20						
Bioaccumulation	N. B.	B	T-B	N. B.	B	T-B	N-B	B	T-B
FBC	< 1000	≥ 1000	≥ 5000	< 10	< 1000	≥ 1000	≤ 20	< 1000	≥ 1000
Log K _{oc}	≤ 4	> 4	≥ 5						
Log K _{oc}				≤ 2,5	< 4,5	≥ 4,5	≤ 2,5	< 4,5	≥ 4,5
Toxicité	N-T	T	T-T	N-T	T	T-T	N-T	T	T-T
Chronique (mg/L)	≥ 0,1	> 0,01	≤ 0,01	≥ 1	> 0,01	≤ 0,01	≥ 5	> 0,05	≤ 0,05
Aiguë (mg/L)	≥ 10	> 1	≤ 1	≥ 1	> 0,01	≤ 0,01	≥ 5	> 0,05	≤ 0,05

Le tableau 4.2 présente les classes utilisées pour chaque propriété environnementale (persistance, bioaccumulation, toxicité). En effet, la Classe 1 définit l'absence de danger pour le milieu récepteur pour la propriété considérée (non persistante (N-P), non bioaccumulable (NB) ou non toxique (NT)), la Classe 2 définit la présence d'un danger potentiel pour la propriété considérée (persistante (P), bioaccumulable (B) ou toxique (T)) et finalement la Classe 3 présente un danger potentiel important pour le milieu récepteur pour la propriété considérée (très persistante (TP), très bioaccumulable (TB) ou très toxique (TT)). Ainsi, chaque substance a été classée selon la catégorie à laquelle elle se réfère en utilisant le principe de précaution, soit en priorisant les données les plus conservatrices parmi les données disponibles. De cette façon, il a été possible de classer les fragrances selon un code de couleur, présenté dans le tableau 4.2, et ce, pour chaque type de données (persistance, bioaccumulation, toxicité) : la couleur verte pour les données de Classe 1, la couleur jaune pour les données de Classe 2 et la couleur rouge pour les données de Classe 3.

Une fois la classe définie pour les trois propriétés environnementales, elles sont combinées afin d'identifier une classe PBT/vPvB globale selon la classification en 27 classes présentées par Gramatica et al. (2015); figure 4.2. Ces auteurs proposent que les classes 1 à 18 identifient les substances comme non PBT et les classes 19 à 27 comme PBT/vPvB. Avec cette classification, il est possible d'émettre une conclusion sur le danger potentiel associé à chaque substance. En effet, les classes 1 à 18 identifient les substances dont le danger pour les milieux récepteurs serait négligeable ou faible, tandis que les classes 19 à 27 identifient celles qui présentent un danger potentiel pour l'environnement et qui devraient ainsi être prioritaires. (Gramatica et al., 2015)

Tableau 4.2 Classification de données disponibles (inspiré de MDDELCC (ministère du Développement durable, 2013))

Catégorisation	Définition	Classe
Non persistant (N-P) Non bioaccumulable (NB) Non toxique (NT)	La substance ne présente pas de danger pour le milieu récepteur et les organismes pour la propriété considérée.	1
Persistant (P) Bioaccumulable (B) Toxique (T)	La substance présente un danger potentiel pour le milieu récepteur et les organismes pour la propriété considérée.	2
Très persistant (TP) Très bioaccumulable (TB) Très toxique (TT)	La substance présente un danger important pour le milieu récepteur et les organismes pour la propriété considérée.	3

Non PBT								PBT/vPvB			
P	B	T	Class	P	B	T	Class	P	B	T	Class
1	1	1	1	1	2	3	10	2	2	2	19
1	1	2	2	2	1	3	11	2	2	3	20
1	1	3	3	1	3	2	12	2	3	2	21
1	2	1	4	3	1	2	13	3	2	2	22
2	1	1	5	2	2	1	14	2	3	3	23
1	3	1	6	3	2	1	15	3	2	3	24
3	1	1	7	1	3	3	16	3	3	1	25
1	2	2	8	3	1	3	17	3	3	2	26
2	1	2	9	2	3	1	18	3	3	3	27

Figure 4.2 Classification PBT/vPvB proposée par Gramatica et al. (tiré de Sangion et Gramatica (2016))

Afin de mieux identifier les dangers environnementaux des substances, la classification a été réalisée pour les trois milieux récepteurs (eau, sédiment et sol). En absence d'information, l'identification sans objet (s.o.) est notée comme classe. Cette indication signifie que les trois catégories sont possibles et que le classement global de la substance selon les 27 classes PBT/vPvB est impossible.

4.3 Résultats de l'exercice de priorisation

Pour permettre une classification la plus représentative possible, différentes comparaisons ont d'abord été effectuées. Cette section présente les données pour les différents milieux récepteurs.

4.3.1 L'eau de surface

L'eau de surface est le milieu récepteur pour lequel on retrouve le plus d'informations disponibles dans la littérature. En effet, plusieurs substances possèdent autant de données acquises de façon expérimentale que grâce à des modèles prédictifs. Un premier exercice de validation a d'abord été effectué afin de vérifier si le classement PBT variait selon le type de données utilisées. Pour ce faire, les fragrances dont des informations étaient disponibles dans les trois types de données ont été utilisées.

Tableau 4.3 Comparaison de la classification entre les données expérimentales et modélisées

Type odeur	Substance	Type de données	P	B	T	Classe	Conclusion
Ambré	Isocyclemone E	Expérimentales				13	Non PBT
		RQSA				23	PBT/vPvB
Animal	Helvetolide	Expérimentales				12	Non PBT
		RQSA				8	Non PBT
	Galaxolide	Expérimentales				27	PBT/vPvB
		RQSA				23	PBT/vPvB
	Zénolide	Expérimentales				3	Non PBT
		RQSA				10	Non PBT
	Musc cétone	Expérimentales				24	PBT/vPvB
		RQSA				20	PBT/vPvB
	Musc xylène	Expérimentales				27	PBT/vPvB
		RQSA				27	PBT/vPvB

Les six substances identifiées dans le tableau 4.3 présentent les résultats de cette comparaison. De façon générale, aucune modification importante concernant la conclusion du classement PBT/vPvB n'est observée, excepté pour l'Isocyclemone E (CAS 54464-57-2). En somme, trois types de résultats ont été observés à la suite de cette comparaison.

Le premier résultat est une concordance entre les données modélisées et expérimentales démontrée avec le musc xylène (CAS 81-15-2). Cette concordance entre les deux types de données peut provenir du fait que la substance est connue depuis longtemps, ce qui permet au modèle mathématique d'estimer une valeur plus représentative étant donné le grand nombre de données disponibles. De plus, plusieurs études expérimentales permettent une meilleure représentativité de la substance. Par opposition, une substance peu connue possède moins d'informations et engendre une estimation plus approximative. (Benfenati, 2012)

Le deuxième résultat démontre que les données expérimentales estiment un danger plus élevé que les données modélisées. En effet, le musc cétone (CAS 81-14-1) présente une classe de 20 pour les données modélisées et de 24 pour les données expérimentales. Bien que la classe PBT/vPvB ne varie pas, la classification T-P provient d'une seule étude expérimentale dans laquelle un inoculum de boue de traitement tertiaire a été utilisé et non une eau de rivière. Cette variante fait en sorte qu'un plus grand nombre de matières en suspension est présent dans le milieu, ce qui produit une flore bactérienne différente entre les deux milieux. Or, le caractère lipophile de cette substance implique qu'elle a tendance à s'adsorber sur la matière en suspension. De ce fait, la quantité de matière en suspension influence la dégradation et le devenir de la molécule (Beaumont J, 2012). De plus, il est plus difficile pour les bactéries de dégrader la molécule et les matières en suspension (Pommeruy, Cormier, Brunel et Breton, 1987).

Le dernier résultat présente des données modélisées avec un danger plus élevé que les données expérimentales. En effet, le zénolide (CAS 54982-83-1) présente une classe 10 avec les données modélisées et une classe 3 avec les données expérimentales. Cette différence entre les catégories peut s'expliquer par le fait que les modèles mathématiques se basent sur la structure de la molécule et ajoutent des facteurs de protection aux résultats obtenus. Le facteur de protection vient ainsi amplifier le danger potentiel de la molécule sur l'environnement. (Benfenati, 2012)

Des différences importantes ont été observées dans le classement pour l'Isocyclemone E (CAS 54464-57-2). Les données expérimentales disponibles indiquent que cette substance présente un potentiel de persistance, tandis que les données modélisées présentent un potentiel de bioaccumulation. Globalement, si le principe de précaution est appliqué et que les données modélisées les plus déclassantes sont utilisées, une classe PBT/vPvB de 23 est identifiée pour cette substance, ce qui augmente son potentiel de danger pour l'environnement. Lorsque les données sont analysées plus spécifiquement, on remarque que les données RQSA pour la bioaccumulation priorisent le $\log K_{oe}$ de 5,7, alors que les données expérimentales correspondent à un FBC ou FBA. Or, le $\log K_{oe}$ donne de l'information sur le caractère hydrophobe de la substance, alors que le FBA démontre la capacité de la substance à s'accumuler dans les graisses des organismes. Cependant, le fait qu'une molécule est hydrophobe ne fait pas d'elle une molécule qui s'accumule nécessairement dans les graisses. En effet, les organismes peuvent avoir développé des processus qui leur permettent de métaboliser ou d'excréter la molécule. (Van Gestel, Otermann et Canton, 1985) En ce qui concerne les données de persistance, il est difficile d'expliquer hors de tout doute la différence de classe entre le type de données. Trois données expérimentales indiquent la persistance de l'Isocyclemone E (CAS 54464-57-2) dans l'eau. Cependant, l'eau utilisée provient de matrices issues de systèmes de traitement des eaux municipales qui, tout comme le cas du musc cétone (CAS 81-14-1), correspond davantage à un effluent qu'à une eau de surface. Les données modélisées proviennent d'un

modèle fréquemment utilisé qui ne présente pas de variations importantes comme des facteurs de protection surestimés. Il est donc difficile de conclure que l'un des deux types de données est meilleur que l'autre.

Il convient de noter que de manière générale, la présence de variabilité des résultats entre les modèles rend difficile l'évaluation objective des substances. En effet, ces modèles se basent sur la structure des molécules et sur leurs propriétés physiques. Ainsi, des éléments comme la chiralité, la taille de la structure et les modifications mineures entre énantiomères ne sont pas nécessairement considérées (Beaumont J, 2012, Chtita, 2017). C'est pour cette raison que les temps de demi-vie des lactones sont si semblables. Par ailleurs, très peu de données de toxicité estimées sont disponibles chez d'autres espèces que les poissons, les daphnies et les algues. De plus, ces informations restent généralement vagues, puisqu'elles renseignent peu sur la mesure de toxicité observée et sur l'espèce spécifique utilisée.

La faible quantité d'études expérimentales disponibles pour les fragrances complexifie l'interprétation des résultats et la comparaison avec les résultats de modèles prédictifs. En effet, dans certains cas, une seule étude est disponible sur la substance et parfois cette étude contredit les données modélisées. Il devient ainsi difficile de conclure que l'étude expérimentale est plus représentative que les données modélisées, puisqu'aucune autre donnée ne vient contredire ou confirmer la première étude (Chtita, 2017).

En résumé, malgré les incertitudes présentées, aucune différence majeure n'apparaît dans le classement global de la substance et, faute de résultats expérimentaux suffisants, il est possible d'utiliser les deux types de données dans un processus de priorisation ayant pour objectif de définir les besoins d'acquisition de connaissance.

Comme mentionné ci-haut, certaines données modélisées possèdent des facteurs de protection plus conservateurs que d'autres. Ces observations ont d'ailleurs été notées avec les modèles ECOSAR™ et OASIS, lesquels présentent des facteurs de protection de 10 à 100 fois plus sévères que les autres modèles disponibles. La présence de ces facteurs peut contribuer à une surestimation de la toxicité réelle. Ainsi, afin de déterminer l'incidence de ces facteurs de protection, une comparaison a été réalisée entre les données modélisées. Pour ce faire, une catégorisation des substances a été réalisée en excluant les données des modèles ECOSAR™ et OASIS. Cette catégorisation a été comparée avec la catégorisation basée sur l'ensemble des données modélisées. Le tableau 4.4 présente les différences observées dans les classifications des composés.

De façon générale, les modèles ECOSAR™ et OASIS donnent des informations sur la bioaccumulation et la toxicité des substances. Ainsi, aucune modification n'a été observée dans la catégorisation des données de persistance. En considérant les résultats de ces modèles, six substances ont été catégorisées avec un potentiel de danger plus élevé pour la toxicité, soit l'ambre kéral, le moscène, l'ambre spiroène, le musc tibétène, l'isocyclemone E et le musc ambrette. Il est également remarqué que le cervolide est catégorisé

avec un potentiel plus élevé pour la bioaccumulation, alors que le musc xylène indique un potentiel de danger plus élevé autant pour la toxicité que la bioaccumulation. Cependant, les différences dans les catégorisations font que les classes PBT/vPvB se trouvent généralement peu changées.

Néanmoins, lorsque les résultats de ces modèles ne sont pas considérés, une substance diffère d'une classe PBT/vPvB (20) à une classe non PBT (14), soit le musc ambrette (CAS 83-66-9). Ceci s'explique par le fait qu'en excluant les données des modèles ECOSAR™ et OASIS basées principalement sur des effets aigus, ce sont alors des données de toxicité chroniques qui sont utilisées, celles-ci présentant un portrait de toxicité moins élevé.

Les données, estimées par les modèles ECOSAR™ et OASIS, ont été conservées et non pas à être exclues du présent exercice de priorisation.

Tableau 4.4 Comparaison de la classification entre les données modélisées

Type d'odeur	Substance	Classification des fragrances en excluant les données des modèles <i>ECOSAR</i> TM et OASIS					Classification des fragrances basées sur l'ensemble des données estimées par des modèles RQSA				
		P	B	T	Classe	Conclusion	P	B	T	Classe	Conclusion
Ambré	Ambre ketal				26	PBT/vPvB				27	PBT/vPvB
Animal	Moscène				26	PBT/vPvB				27	PBT/vPvB
Animal	Galaxolide				23	PBT/vPvB				23	PBT/vPvB
Ambré	Ambre spiroène				22	PBT/vPvB				24	PBT/vPvB
Animal	Musc xylène				22	PBT/vPvB				27	PBT/vPvB
Animal	Musc tibétène				21	PBT/vPvB				20	PBT/vPvB
Ambré	Isocyclemone E				21	PBT/vPvB				23	PBT/vPvB
Animal	Musc cétone				20	PBT/vPvB				20	PBT/vPvB
Ambré	Cédroxyde				16	Non PBT				16	Non PBT
Animal	Ambrettolide				16	Non PBT				16	Non PBT
Animal	Exaltolide				16	Non PBT				16	Non PBT
Animal	Musc ambrette				14	Non PBT				20	PBT/vPvB
Ambré	Timbérone				12	Non PBT				12	Non PBT
Animal	Helvetolide				12	Non PBT				12	Non PBT
Animal	Éthylène brassylate				10	Non PBT				10	Non PBT
Animal	Globalide				10	Non PBT				10	Non PBT
Animal	Zénolide				10	Non PBT				10	Non PBT
Animal	Cervolide				10	Non PBT				16	Non PBT
Animal	Romandolide				4	Non PBT				4	Non PBT
Animal	Ambrinol				2	Non PBT				2	Non PBT
Animal	Glyceralacétate de phenylacétaldéhyde				1	Non PBT				1	Non PBT
Animal	Indolétal				1	Non PBT				1	Non PBT

Après avoir comparé les données expérimentales et les données modélisées, il est possible de déterminer une liste de priorisation pour les fragrances présentées au chapitre 3. Ainsi, le tableau 4.5 présente la classification de ces substances en appliquant le principe de précaution, soit en utilisant les résultats les plus à risque pour tous les types de données (expérimentales et modélisées confondues).

Tableau 4.5 Classification PBT/vPvB des données disponibles pour les 22 fragrances dans l'eau

Type d'odeur	Substance	P	B	T	Classe	Conclusion
Ambré	Isocyclemonone E				27	PBT/vPvB
Ambré	Ambre ketal				27	PBT/vPvB
Animal	Galaxolide				27	PBT/vPvB
Animal	Moscène				27	PBT/vPvB
Animal	Musc xylène				27	PBT/vPvB
Animal	Musc cétone				24	PBT/vPvB
Animal	Musc tibétène				23	PBT/vPvB
Ambré	Ambre spiroène				21	PBT/vPvB
Animal	Musc ambrette				20	PBT/vPvB
Animal	Romandolide				19	PBT/vPvB
Ambré	Cédroxyde				16	Non PBT
Animal	Ambrettolide				16	Non PBT
Animal	Exaltolide				16	Non PBT
Animal	Cervolide				16	Non PBT
Animal	Helvetolide				12	Non PBT
Ambré	Timbérone				12	Non PBT
Animal	Éthylène brassylate				10	Non PBT
Animal	Globalide				10	Non PBT
Animal	Zénolide				10	Non PBT
Animal	Glyceralacétate de phenylacétaldéhyde				8	Non PBT
Animal	Indolétal				7	Non PBT
Animal	Ambrinol				3	Non PBT

Ainsi, sur les 22 substances détaillées, dix fragrances possèdent une classe PBT/vPvB et douze non PBT.

Parmi les dix substances PBT/vPvB, cinq présentent un ion ammonium comme groupement fonctionnel, soit le moscène, le musc xylène, le musc cétone, le musc tibétène et le musc ambrette. Ce dernier est interdit d'utilisation dans les cosmétiques, alors que le moscène (CAS 116-66-5) ne peut être importé et manufacturé à un volume supérieur à dix tonnes par année au Canada. Ainsi, il est possible de réduire leur classement et prioriser d'autres substances PBT/vPvB plus utilisées. Trois substances de type ambré

(isocyclemonone E, ambre k  tal et ambre sp  rol  ne) ont   galement   t   class  es comme PBT/vPvB ainsi que le galaxolide (1222-05-5) et le romandolide (236391-76-7).

Il est aussi observ   que certaines substances poss  dent un caract  re tr  s toxique, sans toutefois   tre persistantes et bioaccumulables. De fa  on g  n  rale, leur classement est identifi   non PBT. C  est le cas de l  ambrinol (CAS 41199-19-3), de l   thyl  ne brassylate 105-95-3, du globalide 34902-57-3 et du z  nolide (CAS 54982-83-1). Cependant, si ces substances sont mesur  es dans les rejets municipaux, leur classification devrait   tre revue    la hausse. En effet, les organismes qui vivent pr  s d  un rejet municipal sont susceptibles de se trouver en contact constant avec des mol  cules potentiellement toxiques, m  me si elles sont non persistantes et ni bioaccumulables.

La classification r  alis  e avec l  outil de priorisation pour l  eau de surface a permis de d  montrer que l  utilisation des donn  es exp  rimentales ou mod  lis  es disponibles influence peu la classification des fragrances et l  exercice a aussi permis d  identifier les dix substances PBT/vPvB    prioriser.

4.3.2 Les s  diments

Les s  diments repr  sentent un milieu de vie dans lequel plusieurs organismes et microorganismes peuvent se d  velopper et se nourrir. Malheureusement, tr  s peu d  informations sont disponibles concernant la persistance, la bioaccumulation ou la toxicit   des fragrances dans cette matrice, ce qui limite leur classification. Le manque de donn  es n  a pas permis de comparer les donn  es exp  rimentales et mod  lis  es. Le tableau 4.6 pr  sente le classement de ces substances pour les s  diments.

Tableau 4.6 Classification PBT/vPvB des donn  es disponibles pour les 22 fragrances dans les s  diments

Type d'odeur	Substance	P	B	T	Classes	Conclusion
Animal	Helvetolide				26	PBT/vPvB
Animal	Romandolide				22	PBT/vPvB
Animal	Galaxolide				21	PBT/vPvB
Ambr��	Isocyclemonone E				10	Non PBT
Ambr��	C��droxyde				10	Non PBT
Animal	Musc xyl��ne				s. o.	s. o.
Ambr��	Ambre sp��rol��ne				s. o.	s. o.
Animal	Musc c��tone				s. o.	s. o.
Animal	Musc ambrette				s. o.	s. o.

Tableau 4.6 Classification PBT/vPvB des données disponibles pour les 22 fragrances dans les sédiments (suite)

Type d'odeur	Substance	P	B	T	Classes	Conclusion
Animal	Moscène				s. o.	s. o.
Animal	Musc tibétène				s. o.	s. o.
Ambré	Ambre kéal				s. o.	s. o.
Ambré	Timbéról				s. o.	s. o.
Animal	Ambrinol				s. o.	s. o.
Animal	Indolétal				s. o.	s. o.
Animal	Ambrettolide				s. o.	s. o.
Animal	Exaltolide				s. o.	s. o.
Animal	Éthylène brassylate				s. o.	s. o.
Animal	Globalide				s. o.	s. o.
Animal	Zénolide				s. o.	s. o.
Animal	Cervolide				s. o.	s. o.
Animal	Glycéracétate de phenylacétaldéhyde				s. o.	s. o.

Les quelques données disponibles tendent à indiquer que la plupart des substances possèdent un potentiel de persistance dans les sédiments et que, de façon générale, ce milieu récepteur est susceptible d'accumuler ces substances et, ainsi, devenir une source de danger pour l'environnement. De façon plus spécifique, les muscs de la quatrième génération, l'helvetolide (CAS 141773-73-1), le romandolide (236391-76-7) ainsi que le galaxolide (1222-05-5) sont classés comme PBT/vPvB dans les sédiments. Le manque d'informations limite de façon importante la classification, puisque 17 substances se trouvent avec une classe s. o. En appliquant le principe de précaution pour ces substances, la totalité de celles-ci se retrouverait classée comme PBT/vPvB présentant ainsi, les sédiments comme sensibles aux fragrances.

Ces substances persistantes dans les sédiments sont également susceptibles de se retrouver dans les boues des stations d'épuration. Or, depuis 2011, il est possible au Québec d'épandre les boues de stations d'épuration sur les terres agricoles. Cette technique est permise depuis l'adoption de la Politique québécoise de gestion des matières résiduelles. Or, bien que les boues de traitement possèdent tous les éléments utiles pour permettre d'enrichir le sol, elles peuvent contenir des métaux et des composés organiques néfastes pour le sol agricole. De plus, une fois la boue épandue, le devenir de la molécule peut varier en fonction de ses propriétés. Toutefois, pour des substances hydrophobes comme les fragrances, celles-ci risquent plutôt de s'accumuler ou encore de se retrouver dans les sédiments. (Hébert, 2012) Puisque peu d'études de toxicité chronique ont été réalisées, il est difficile de prédire si les organismes des sols et des sédiments seraient affectés par la présence de fragrances.

Les sédiments et les boues d'épuration sont donc des matrices pour lesquelles des études doivent être prioritaires en raison du peu de données disponibles et de leurs potentiels de persistance non négligeable. De plus, les différentes concentrations, présentées dans les boues au chapitre 3, démontrent que celles-ci pourraient affecter les organismes présents dans les sédiments ou dans le sol lors de l'épandage des boues.

4.3.3 Le sol

Bien qu'un plus grand nombre de données soit disponible pour le sol, il est toujours difficile de comparer les résultats de classement obtenus à partir de données modélisées et de données expérimentales. Le sol étant un milieu plus complexe que l'eau, il pourrait amener une différence plus importante entre les types de données. Le tableau 4.7 présente la classification des fragrances.

Tableau 4.7 Classification PBT/vPvB des données disponibles pour les 22 fragrances dans les sols

Type d'odeur	Substance	P	B	T	Classes	Conclusion
Animal	Galaxolide				25	PBT/vPvB
Animal	Musc xylène				25	PBT/vPvB
Animal	Helvetolide				18	Non PBT
Animal	Musc tibétène				18	Non PBT
Animal	Ambrettolide				17	Non PBT
Animal	Éthylène brassylate				17	Non PBT
Animal	Moscène				15	Non PBT
Animal	Romandolide				14	Non PBT
Animal	Musc cétone				14	Non PBT
Animal	Musc ambrette				14	Non PBT
Animal	Exaltolide				6	Non PBT
Ambré	Isocyclemone E				6	Non PBT
Animal	Globalide				4	Non PBT
Ambré	Ambre ketal				s.o.	s.o.
Ambré	Timbérone				s.o.	s.o.
Animal	Ambrinol				s.o.	s.o.
Ambré	Ambre spirolène				s.o.	s.o.
Animal	Indolétal				s.o.	s.o.
Animal	Cédroxyde				s.o.	s.o.
Animal	Zénolide				s.o.	s.o.
Animal	Cervolide				s.o.	s.o.
Animal	Glyceralacétate de phénylacétaldéhyde				s.o.	s.o.

Seules deux substances sont identifiées comme PBT/vPvB. Il s'agit du galaxolide et du musc xylène. Onze substances ont une classification non PBT. Parmi les substances pour lesquelles une classe n'a pu être identifiée (potentiel toxique), l'ambre kétal (57345-19-4), le timbérol (CAS 70788-30-6) et l'ambrinol (CAS 41199-19-3) sont catégorisées comme persistantes et bioaccumulables. Une évaluation de la toxicité permettrait de déterminer le caractère toxique de ces trois substances et de compléter leur priorisation et leur classification.

D'après les résultats obtenus, il semble que le sol est le milieu récepteur le moins prioritaire pour le moment.

L'utilisation du principe de précaution a cependant pu engendrer certaines incertitudes dans la classification des substances, puisque l'outil utilise le pire cas. Dans certaines situations, le pire cas n'est pas forcément ce qui est le plus représentatif. De la même façon que pour les données modélisées ECOSAR™ et OASIS, la présence d'une seule étude expérimentale peut influencer le classement PBT/vPvB, et ce, même si l'étude suit un protocole reconnu. De plus, l'outil ne distingue pas les propriétés à prioriser par catégorie, comme le FBC et K_{oe} . Une substance peut donc être considérée très bioaccumulable sans que des études aient démontré qu'elle s'accumule dans les tissus des organismes.

L'utilisation du principe de précaution et les critères utilisés présentent également une classification différente de celle proposée par le gouvernement canadien. En effet, dans le chapitre 3, les conclusions émises par le Gouvernement canadien présentaient, de façon générale, les substances comme ne dépassant pas les critères canadiens, donc ne nécessitant pas d'étude d'évaluation de danger. En opposition, les résultats obtenus avec l'exercice de priorisation démontrent un danger potentiel pour les fragrances, ce qui nécessiteraient plus d'études afin d'évaluer si elles peuvent causer des problématiques environnementales.

5. RECOMMANDATIONS

Ce chapitre a pour objectif de présenter des recommandations concernant les résultats obtenus dans les chapitres précédents. Pour ce faire, des recommandations seront émises pour les milieux récepteurs et pour l'outil de priorisation.

L'exercice avait comme objectif de proposer un ordre de priorisation pour la mise en place d'études complémentaires pour les 22 fragrances identifiées au chapitre 3, en fonction du milieu récepteur. Dans l'eau de surface, 11 composés sont considérés comme PBT/vPvB, alors que dans les sédiments et les sols le manque d'informations ne permet pas de compléter la priorisation des 22 substances. Cependant, il y a suffisamment d'informations sur le galaxolide (CAS 1222-05-5) pour le considérer comme une substance à prioriser dans les trois types de milieux récepteurs. D'autres fragrances, comme l'ambre kétal (57345-19-4), semblent présenter des dangers potentiels dans les différents milieux. Des études supplémentaires sont nécessaires pour compléter les informations manquantes afin de bien évaluer le danger de ces substances sur l'environnement.

5.1 Recommandations pour l'eau

Les fragrances ont été détectées dans des eaux de surface dans plusieurs études effectuées en Amérique du Nord, en Europe et en Asie. Il est donc conseillé de débiter par vérifier la présence des substances avec un potentiel de danger plus important pour l'environnement dans les effluents. Il serait utile d'adapter les méthodes d'analyse disponibles afin de commencer à évaluer leur présence dans les rejets municipaux ainsi que dans les eaux de surface. Les substances possédant comme groupe fonctionnel principal l'ion ammoniac et les substances dont l'odeur réfère au type ambré. Cette vérification est jugée utile, car bien que le musc ambrette (CAS 83-66-9) et le musc tibétène (CAS 145-39-1) soient interdits d'utilisation au Canada et en Europe, ils ont été mesurés dans les eaux de surface et les effluents municipaux d'Espagne.

Pour les substances dont les données sont peu ou pas disponibles, comme c'est le cas pour le cédroxyde (CAS 13786-79-3), le timbérool (CAS 70788-30-6), l'ambrinol (CAS 4199-19-3) et l'ambrettolide (CAS 123-69-3), des études sont nécessaires pour évaluer leur potentiel de persistance, de bioaccumulation et de toxicité et pour compléter les informations nécessaires pour leur priorisation, mais également pour évaluer les dangers associés aux composés.

5.2 Recommandations pour les sédiments

Les données de persistance et le coefficient de partage octanol-eau semblent indiquer que, de façon générale, les fragrances auraient tendance à s'accumuler dans les sédiments et les boues d'épuration. Ainsi, il serait souhaitable que ces matrices soient considérées prioritaires lors de la mise en place de suivis et d'études écotoxicologiques sur ce groupe de molécules.

Ainsi, il serait conseillé de débiter avec des études de toxicité chez des espèces benthiques comme la larve de diptère (*Chironomus riparius*) ou l'amphipode (*Hyaella azteca*). Une fois ces études complétées, il serait plus simple de déterminer si ces substances représentent un danger pour les organismes benthiques et d'établir un seuil de toxicité pour évaluer les résultats d'éventuels suivis environnementaux. Des études sur le potentiel de bioaccumulation de ses substances doivent également être réalisées pour les organismes benthiques afin de compléter les informations disponibles.

Certaines études, présentées au chapitre 3, démontrent leur capacité à détecter ces substances dans les sédiments. Une fois les données de toxicité disponibles, des méthodes d'analyse devraient être mises en place pour détecter ces substances et permettre la réalisation de suivis environnementaux, et également pour vérifier les concentrations dans des boues d'épuration pour évaluer les dangers de transfert vers les sols ou les cours d'eau après l'épandage.

Une fois les données complétées, il sera possible de conduire un second exercice de priorisation pour évaluer les dangers associés à ces substances potentiellement présentes dans les sédiments.

5.3 Recommandation pour le sol

Pour les sols, les recommandations sont les mêmes que celles émises pour les sédiments, c'est-à-dire de réaliser des études de toxicité chez des espèces comme le ver de terre (*Eisenia andrei*) et de développer des méthodes d'analyses afin d'évaluer leur présence dans les sols.

5.4 Recommandations spécifiques

Certaines substances nécessitent des recommandations plus spécifiques. Le galaxolide (CAS 1222-05-5) présente des classes PBT/vPvB élevées pour les trois milieux récepteurs analysés. Ainsi, cette substance devrait être la première dont la présence dans l'environnement devrait être documentée.

De plus, lors d'études concernant le suivi de l'helvetolide (CAS 141773-73-1), il serait pertinent d'analyser aussi son sous-produit de dégradation l'helvetol (CAS 141773-71-9), puisque selon la littérature, cette substance est persistante dans l'environnement. Il serait également important d'évaluer si d'autres substances possèdent des sous-produits de dégradation qui pourraient s'avérer plus nocifs pour l'environnement que les molécules mères.

5.5 Recommandations concernant l'outil de priorisation

Il serait intéressant de comparer les résultats obtenus à l'aide de cet exercice de priorisation avec ceux d'autres critères de classification. De cette façon, il serait possible de déterminer si les critères utilisés sont trop conservateurs et voir si la classification varie de manière importante. Ainsi, il serait possible de comparer avec des classifications obtenues ailleurs comme celle du gouvernement canadien. (ECC, 2017)

En effet, le gouvernement canadien prend en compte les volumes d'importation et de production ainsi que les dangers potentiels d'exposition à une substance. En tenant compte de ces paramètres, il serait possible de voir des modifications qui nécessiteraient des corrections dans les critères utilisés.

Il serait également nécessaire d'identifier quels paramètres doivent être priorisés lors de la catégorisation des données. Par exemple, pour évaluer la bioaccumulation, est-ce que le facteur de bioconcentration est plus important que le coefficient de partage octanol-eau?

Dans la situation où très peu de données sont disponibles, l'utilisation du principe de précaution est recommandée. Cependant, dans une situation où il y a beaucoup plus de données, d'autres méthodes pourraient être utilisées avec une pondération différente. Par exemple, une méthode plus quantitative pourrait être mise en place où une pondération serait accordée pour les données modélisées et une seconde pour les données expérimentales. Si le nombre de données est trop imposant, il serait possible d'exclure certaines données à l'aide de méthodes statistiques (méthode des quartiles ou de la moyenne).

CONCLUSION

La présence des contaminants d'intérêt émergent est un enjeu environnemental important qui nécessite une attention particulière de la part des différentes instances gouvernementales. Par l'évaluation de la LIS, le Canada produit une première évaluation pour déterminer si ces nouvelles substances peuvent causer des menaces pour la santé humaine et l'environnement.

De ces contaminants, les fragrances utilisées dans l'industrie des produits de soin corporel et des détergents peuvent se retrouver dans les effluents municipaux et, finalement, dans les cours d'eau, les boues et les sols. Cet essai avait comme objectif d'évaluer les dangers écotoxicologiques associés aux fragrances synthétiques présentes dans les produits de soins corporels ou dans les détergents et de faire un exercice de priorisation, afin d'évaluer les besoins d'études complémentaires. Afin de répondre à cet objectif, différents objectifs spécifiques ont été réalisés, soit l'identification et la présentation des différents groupes de fragrances; la réalisation d'une revue de littérature permettant d'évaluer la présence et la persistance de 22 fragrances dans l'environnement ainsi que leur caractère bioaccumulable et toxique; la réalisation d'un exercice de classement des fragrances identifiées afin de prioriser les besoins de recherche sur ces substances.

Le premier chapitre présente des généralités à propos des fragrances que ce soit leur histoire, leur principale utilisation dans les cosmétiques et les détergents et la présentation des différentes réglementations des fragrances au point de vue mondial.

Dans le deuxième chapitre, en plus d'identifier les différents groupes de fragrances existants, des substances faisant partie de ces groupes ont été sélectionnées. Ce chapitre a présenté le cheminement qui a permis la classification des groupes de fragrances et l'identification des substances évaluées dans le chapitre 3. Ce 3^e chapitre met en lumière les propriétés physico-chimiques et la présence dans l'environnement des fragrances en plus de présenter les informations relatives à leur persistance, leur bioaccumulation et leur toxicité. Ces informations ont permis de présenter les fragrances comme des substances généralement hydrophobes, ce qui favorise leur interaction avec les matières en suspension des milieux aquatiques et explique que ces substances pourraient se retrouver dans les sédiments des cours d'eau et dans les boues d'épuration. Ce sont des substances dont la persistance varie selon le milieu dans lequel elles se retrouvent, mais selon l'ECHA et la LIS, qui ne présentent pas de dangers importants pour la santé humaine et l'environnement.

Par la suite, le chapitre 4 a présenté l'exercice de priorisation réalisé avec la démarche de priorisation en cours de développement au CEAEQ. L'outil et la méthodologie utilisés pour catégoriser et classer les informations disponibles à la suite de la revue de littérature y sont présentés. Les différents critères utilisés correspondent à ceux du MDDELCC et de l'US EPA pour les eaux de surface et ceux de l'étude de Homem

et al. (2015) pour les sols et sédiments. Ainsi, ce chapitre présente la classification PBT/vPvB pour chaque substance et chaque milieu récepteur, l'ordre de priorisation pour la réalisation d'évaluation de danger et la mise en place d'études d'acquisition de connaissance. Certaines incertitudes sont également présentées sur les données et sur l'outil, notamment, l'utilisation du principe de précaution. Certaines de ces incertitudes ont d'ailleurs été vérifiées, par exemple la comparaison entre les données expérimentales et les données modélisées ainsi que celle entre les données modélisées avec ou sans retrait des modèles trop conservateurs.

Finalement, le chapitre 5 présente des recommandations relatives à la priorisation de l'information et aux besoins de recherches pour les différents milieux. Celles-ci priorisent la réalisation d'études expérimentales dans les sédiments et dans les sols, puisque peu d'informations expérimentales existent pour ces matrices. Il est également conseillé de déterminer la présence de ces fragrances dans les milieux récepteurs québécois, car plusieurs études identifient celles-ci comme présentes dans l'environnement. Des recommandations spécifiques sont également suggérées pour deux substances, soit le galaxolide qui représente un niveau de danger plus élevé pour l'ensemble des matrices étudiées et l'helvetolide dont sa dégradation dans l'eau mène à une molécule potentiellement plus à risque. Finalement, des recommandations pour l'outil ont également été réalisées, par exemple, pour une situation où le nombre de données est très différent.

L'ensemble de ces chapitres a ainsi permis de répondre aux objectifs spécifiques et de compléter l'objectif général de cet essai. Ainsi, une évaluation des dangers écotoxicologiques et de la priorisation des besoins d'études concernant les fragrances synthétiques a été réalisée. Bien que cet essai présente une très petite partie des fragrances retrouvées dans l'industrie, ces informations ont permis d'indiquer que la génération de nouvelles données est primordiale avant la mise en place de critères légaux. Ainsi, l'évaluation des autres groupes d'odeurs (ligneux ou terreux) est une piste à explorer pour permettre de compléter l'identification des fragrances prioritaires.

RÉFÉRENCES

- 1,5,9-trimethylcyclododeca-1,5,9-triene epoxide. (2000). *Food and Chemical Toxicology*, 38, s185-s187. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0278691500800599>.
- Adema D. et Langerwerf J. (1985). *The acute toxicity of E-2642.01 (musk xylene)*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (1995). *Bioavailability*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2005). *4'-tert-butyl-2',6'-dimethyl-3',5'-dinitroacetophenone (musk ketone)*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/e6a84904-118b-447a-8766-f7bda48f7ce0>.
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2008). *European Union Risk Assessment Report 1,3,4,6,7,8-HEXAHYDRO-4,6,6,7,8,8- EXAMETHYLCYCLOPENTA-γ-2-BENZOPYRAN (1,3,4,6,7,8-HEXAHYDRO-4,6,6,7,8,8-HEXAMETHYLIN-DENO[5,6-C]PYRAN - HHCB)* Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/947def3b-bbbf-473b-bc19-3bda7a8da910>.
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2011a). 1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-2,3,8,8-tetramethyl-2-naphthyl)ethan-1-one. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/15069/1>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2011b). 1,4-dioxacyclohexadecane-5,16-dione. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/2219>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2011c). A mixture of: (E)-oxacyclohexadec-12-en-2-one; (E)-oxacyclohexadec-13-en-2-one; a) (Z)-oxacyclohexadec-(12)-en-2-one and b) (Z)-oxacyclohexadec-(13)-en-2-one. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/5971/11>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2013a). 1,4-dioxacycloheptadecane-5,17-dione. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/14715>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2013b). Pentadecan-15-olide. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/5937>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2013c). *Reaction mass of (1S,1'R)-[1-(3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl)ethoxycarbonyl]methyl propanoate, (1R,1'R)-[1-(3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl)ethoxycarbonyl]methyl propanoate and (1R*,2'R*)-(2,6,6-trimethyl-1-cycloheptyloxy)carbonyl)methyl propanoate*. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/11404>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2016a). 2-(1-[3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl]ethoxy)-2-methyl propyl propanoate. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/16836>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2016b). *Guide pratique: Comment utiliser les alternatives aux essais sur les animaux pour remplir vos obligations d'information dans le cadre de l'enregistrement au titre de REACH*. Repéré à https://echa.europa.eu/documents/10162/13655/practical_guide_how_to_use_alternatives_fr.pdf/87246232-f0e8-46bf-a69a-9ab32530de5c.
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2017a). (1S,1'R)-[1-(3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl)ethoxycarbonyl]methyl propanoate. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/9339>

- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2017b). 12-oxahexadecan-16-olide. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/20729>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2017c). Benzeneacetaldehyde, cyclic acetal with glycerol. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/19840>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2017d). Spiro[1,3-dioxolane-2,5'-(4',4',8',8'-tetramethyl-hexahydro-3',9'-methanonaphthalene)]. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/4325>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2018a). 4,4a,5,9b-tetrahydroindeno[1,2-d]-1,3-dioxin. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/22733/1>
- Agence européenne des produits chimiques (ECHA). (2018b). Dodecahydro-3,8,8,11a-tetramethyl-5H-3,5a-epoxynaphth[2,1-c]oxepin. Repéré à <https://echa.europa.eu/fr/registration-dossier/-/registered-dossier/21986>
- Api A. M., Belsito D., Botelho D., Browne D., Bruze M., Burton G. A.,... Wahler J. (2017). RIFM fragrance ingredient safety assessment, ethylene dodecanedioate, CAS registry number 54982-83-1. *Food and Chemical Toxicology*, 110, S670-S678. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0278691517306488>.
- Arbulu M., Sampedro M. C., Unceta N., Gómez-Caballero A., Goicolea M. A. et Barrio R. J. (2011). A retention time locked gas chromatography–mass spectrometry method based on stir-bar sorptive extraction and thermal desorption for automated determination of synthetic musk fragrances in natural and wastewaters. *Journal of Chromatography A*, 1218(20), 3048-3055. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021967311003475>.
- Aschmann S. M., Arey J., Atkinson R. et Simonich S. L. (2001). Atmospheric Lifetimes and Fates of Selected Fragrance Materials and Volatile Model Compounds. *Environmental Science & Technology*, 35(18), 3595-3600. Repéré à <https://doi.org/10.1021/es010685i>.
- Balk F. et Ford R. A. (1999). Environmental risk assessment for the polycyclic musks, AHTN and HHCb: II. Effect assessment and risk characterisation. *Toxicology Letters*, 111(1), 81-94. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378427499001708>.
- Beaumont J C. C., Lestremay F. (2012). *Analyse de substance prioritaires et émergentes dans les eaux*. Repéré à https://www.aquaref.fr/system/files/IA02_DRC_12_118929_01419A_VF_0.pdf.
- Benfenati E. (2012). *Book Theory, guidance and applications on QSAR and REACH*: Repéré à http://ebook.insilico.eu/insilico-ebook-orchestra-benfenati-ed1_rev-June2013.pdf
- Bester K., Hüffmeyer N., Schaub E. et Klasmeier J. (2008). Surface water concentrations of the fragrance compound OTNE in Germany – A comparison between data from measurements and models. *Chemosphere*, 73(8), 1366-1372. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653508008382>.
- Boethling R. S. (2011). Incorporating environmental attributes into musk design. *Green Chemistry*, 13(12), 3386-3396. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1039/C1GC15782E>.
- Boleas S., Fernandez C. et Tarazona J. V. (1996). *Toxicological and kinetic study of musk xylene in rainbow trout, Oncorhynchus mykiss*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Bridges B. (2002). Fragrance: emerging health and environmental concerns. *Flavour and Fragrance Journal*, 17(5), 361-371. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/ffj.1106>.

- Bureau conseil parfums tendances et inspirations. (2000). Matières premières naturelles ou synthétiques ? L'éternel faux débat. Repéré à <https://parfums-tendances-inspirations.com/2010/06/11/matieres-premieres-naturelles-ou-synthetiques-leternel-faux-debat/>
- Bureau conseil parfums tendances et inspirations. (2011). L'histoire du parfum : de l'antiquité à la parfumerie moderne. Repéré à <https://parfums-tendances-inspirations.com/2011/10/28/lhistoire-du-parfum-de-lantiquite-a-la-parfumerie-moderne/>
- Butte W., Schmidt S. et Schmidt A. (1999). Photochemical degradation of nitrated musk compounds. *Chemosphere*, 38(6), 1287-1291. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653598005293>.
- Büttner M. W., Burschka C., Junold K., Kraft P. et Tacke R. (2007). Disila-Okoumal: A Silicon Analogue of the Ambergris Odorant Okoumal. *ChemBioChem*, 8(12), 1447-1454. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cbic.200700201>.
- Calame R. et Ronchi W. (1989). *Musk ketone : determination of the ready biodegradability*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/e6a84904-118b-447a-8766-f7bda48f7ce0>
- Calame R. et Ronchi W. (1989). *Musk xylene: determination of the ready biodegradability*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Cavalheiro J., Prieto A., Monperrus M., Etxebarria N. et Zuloaga O. (2013). Determination of polycyclic and nitro musks in environmental water samples by means of microextraction by packed sorbents coupled to large volume injection-gas chromatography–mass spectrometry analysis. *Analytica Chimica Acta*, 773, 68-75. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003267013002705>.
- Chastrette M. (s.d.). L'ambre gris. Repéré à http://www.cnrs.fr/cw/dossiers/doschim/decouv/parfums/loupe_ambre.html
- Chen X., Pauly U., Rehfus S. et Bester K. (2009). Personal care compounds in a reed bed sludge treatment system. *Chemosphere*, 76(8), 1094-1101. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653509004755>.
- Chtita S. (2017). *Modélisation de molécules organiques hétérocycliques biologiquement actives par des méthodes QSAR/QSPR : Recherche de nouveaux médicaments*. (Doctorat, Université Moulay Ismaïl, Meknès, Maroc). Repéré à <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01568788/document>
- Climent M. J., Corma A. et Velty A. (2004). Synthesis of hyacinth, vanilla, and blossom orange fragrances: the benefit of using zeolites and delaminated zeolites as catalysts. *Applied Catalysis A: General*, 263(2), 155-161. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0926860X03010299>.
- Commission européenne. (s.d.a). Scientific Committees : About. Repéré à https://ec.europa.eu/health/scientific_committees/about_fr
- Commission européenne. (s.d.b). Scientific committees: Scientific committee on consumer safety (SCCS). Repéré à https://ec.europa.eu/health/scientific_committees/consumer_safety_fr
- Commission européenne. (s.d.c). Scientific committees: Scientific committee on health, environmental and emerging risks (SCHEER). Repéré à https://ec.europa.eu/health/scientific_committees/scheer_fr
- Commission européenne. (s.d.d). Substance : 4-tert-Butyl-2,6-dimethyl-3,5-dinitroacetophenone Repéré à http://ec.europa.eu/growth/tools-databases/cosing/index.cfm?fuseaction=search.details_v2&id=28318

- Commission européenne. (s.d.e). Substance : 5-tert-Butyl-2,4,6-trinitro-m-xylene. Repéré à http://ec.europa.eu/growth/tools-databases/cosing/index.cfm?fuseaction=search.details_v2&id=28317
- Corada-Fernández C., Candela L., Torres-Fuentes N., Pintado-Herrera M. G., Paniw M. et González-Mazo E. (2017). Effects of extreme rainfall events on the distribution of selected emerging contaminants in surface and groundwater: The Guadalete River basin (SW, Spain). *Science of The Total Environment*, 605-606, 770-783. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969717314535>.
- Cornwell R. E., Boothroyd L., Burt D. M., Feinberg D. R., Jones B. C., Little A. C., . . . Perrett D. I. (2004). Concordant preferences for opposite-sex signals? Human pheromones and facial characteristics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences*, 271(1539), 635-640. Repéré à <http://rspb.royalsocietypublishing.org/content/royprsb/271/1539/635.full.pdf>.
- Cosmetics alliance Canada. (s.d.). About us. Repéré à <https://www.cosmeticsalliance.ca/about-us/>
- Danish Environmental Protection Agency. (2018). (Q)SAR predicted profile of hexadec-7-en-16-olide. Repéré à <http://qsar.db.food.dtu.dk/db/index.html>
- Danish Environmental Protection Agency. (s.d.). (Q)SAR predicted profile for Oxacyclohexadecen-2-one. Repéré à <http://qsar.db.food.dtu.dk/db/index.html>
- Danish Environmental Protection Agency. (2016). (Q)SAR predicted profile. Repéré à <http://qsar.food.dtu.dk/>
- DiFrancesco A. M., Chiu P. C., Standley L. J., Allen H. E. et Salvito D. T. (2004). Dissipation of Fragrance Materials in Sludge-Amended Soils. *Environmental Science & Technology*, 38(1), 194-201. Repéré à <https://doi.org/10.1021/es034618v>.
- Downthwaite S. V. (2000). Odor Classification. Repéré à <https://www.perfumersworld.com/article/odor-classification>
- Eh M. (2004). *Book New Alicyclic Musks: The Fourth Generation of Musk Odorants: Perspectives in Flavor and Fragrance Research* Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9783906390475.ch12>
- Environnement Canada et Santé Canada. (2013). *Évaluation préalable pour le défi concernant les substances suivantes: N,N-diéthylhydroxylamine, produits de réaction avec l'hexaméthylcyclotrisiloxane, la silice et la bis(triméthylsilyl)amine, 2-[3-(m-chlorophényl)propyl]pyridine et 1,1,3,3,5-pentaméthyl-4,6-dinitroindane (musc moskène)*. Repéré à https://www.ec.gc.ca/es-ees/A8251EAE-71E0-4F4A-B67E-304EC499EC23/FSAR_B12%20-%20SNACs_FR.pdf.
- Environnement et changement climatique Canada (ECC). (2016). *Rapid Screening of Substances identified from Phase Two of the Domestic Substances List Inventory Update*. Repéré à http://ec.gc.ca/es-ees/4EEC3784-BA37-4E63-B0BC-DE7D6D319B93/03-%20RSIII%20FSAR%20ESRABS_FR.pdf.
- Environnement et changement climatique Canada (ECC). (2017). *Évaluation des substances existantes*. Repéré à http://www.ec.gc.ca/es-ees/495117B5-2EBE-4811-81F1-0C4DDFDD730B/EES_FR.pdf.
- Environnement et changement climatique Canada (ECC) et Santé Canada. (2018). *Draft Screening assessment for Macrocyclic lactones and ketones, ionones and cyclohexanone group*. Repéré à <https://www.canada.ca/content/dam/eccc/documents/pdf/pded/macrocyclic-lactones-ketones-ionones-cyclohexanone-group/20180517-DSAR-macrocyclic-lactones-EN.pdf>.

- Environnement et changement climatique Canada et Santé Canada. (2018). *Ébauche d'évaluation préalable du groupe des musc nitrés*. Repéré à <https://www.canada.ca/content/dam/eccc/documents/pdf/pded/nitro-musks/20180911-Nitro-Musks-FR.pdf>.
- Environnement et ressources naturelles Canada. (1999). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 34902-57-3). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=34902-57-3>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006a). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 105-95-3). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=105-95-3>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006b). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 106-02-5). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=106-02-5>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006c). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 1222-05-5). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=1222-05-5>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006d). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 123-69-3). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=123-69-3>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006e). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 18096-62-3). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=18096-62-3>.
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006f). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 29895-73-6). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=29895-73-6>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006g). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 41199-19-3). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=41199-19-3>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006h). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 54464-57-2). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=54464-57-2>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006i). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 54982-83-1). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=54982-83-1>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006j). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 57345-19-4). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=57345-19-4>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006k). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 6707-60-4). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=6707-60-4>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006l). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 81-14-1). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=81-14-1>

- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006m). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 81-15-2). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=81-15-2>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2006n). Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 83-66-9). Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=83-66-9>
- Environnement et ressources naturelles Canada. (2008). *Résultats de catégorisation de la liste intérieure des substances (numéro d'identification : 145-39-1)*. Repéré à <https://pollution-waste.canada.ca/substances-search/Substance/DisplaySubstanceDetails?Id=145-39-1>.
- Federal Food, Drug, and Cosmetic Act*. FD&C act, c. 361.
- Federal Institute for Occupational Safety and Health. (2017). *Reaction mass of (1S,1'R)-2-[1-(3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl)ethoxy]-2-methylpropyl propanoate, (1R,1'R)-2-[1-(3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl)ethoxy]-2-methylpropyl propanoate and 2-methyl-2-[(1R*,2R*)-2,6,6-trimethylcycloheptyl]oxy}propyl propanoate, and 2-(1-[3',3'-dimethyl-1'-cyclohexyl] ethoxy)-2-methyl propyl propanoate*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/9290e5b1-123c-caa3-5772-a53b071de8af>.
- Firmenich. (2016). *Ambrinol*. Repéré à http://firmenich.cdn.oxv.fr/uploads/files/ingredients/marketing-sheet/perfumery/AMBRINOL_908930.pdf?31afe11
- Firmenich. (s.d.a). *Cedroxyde*. Repéré à http://firmenich.cdn.oxv.fr/uploads/files/ingredients/marketing-sheet/perfumery/CEDROXYDE_922470.pdf?31afe11
- Firmenich. (s.d.b). *Helvetolide*. Repéré à http://firmenich.cdn.oxv.fr/uploads/files/ingredients/marketing-sheet/perfumery/HELVETOLIDE_947650.pdf?31afe11
- Firmenich. (s.d.c). *Norlimbanol*. Repéré à http://firmenich.cdn.oxv.fr/uploads/files/ingredients/marketing-sheet/perfumery/NORLIMBANOL_967412.pdf?31afe11
- Frangrantica. (2017). Notes. Repéré à <https://www.fragrantica.com/notes/>
- Fráter G., Bajgrowicz J. A. et Kraft P. (1998). Fragrance chemistry. *Tetrahedron*, 54(27), 7633-7703. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040402098001999>.
- Gatermann R., Biselli S., Hühnerfuss H., Rimkus G. G., Hecker M. et Karbe L. (2002). Synthetic Musks in the Environment. Part 1: Species-Dependent Bioaccumulation of Polycyclic and Nitro Musk Fragrances in Freshwater Fish and Mussels. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 42(4), 437-446. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s00244-001-0041-2>.
- Gautschi M., Bajgrowicz J. A. et Kraft P. (2001). Fragrance Chemistry- Milestones and perspectives. *Chimia*, 55, 379-387. Repéré à <http://www.ingentaconnect.com/content/scs/chimia/2001/00000055/00000005/art00002#>.
- Gavrilescu M., Demnerová K., Aamand J., Agathos S. et Fava F. (2015). Emerging pollutants in the environment: present and future challenges in biomonitoring, ecological risks and bioremediation. *New Biotechnology*, 32(1), 147-156. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1871678414000028>.
- Gramatica P., Cassani S. et Sangion A. (2015). PBT assessment and prioritization by PBT Index and consensus modeling: Comparison of screening results from structural models. *Environment International*, 77, 25-34. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0160412015000045>.
- Grützner I. (1995a). *Influence of musk ketone on the reproduction of Daphnia magna*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/e6a84904-118b-447a-8766-f7bda48f7ce0>.

- Grützner I. (1995b). *Musk ketone: 21-day prolonged toxicity study in the rainbow trout under flow-through conditions*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/e6a84904-118b-447a-8766-f7bda48f7ce0>.
- Grützner I. (1996). *Acute toxicity of musk ketone to Pseudokirchneriella subcapitata*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/e6a84904-118b-447a-8766-f7bda48f7ce0>.
- Hébert M. (2012). *Boues municipales : Politique de recyclage et évaluation des émissions de GES*. Repéré à <http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/matieres/articles/boues-municipales-pol.pdf>.
- HERA. (2004). *Human & Environmental Risk Assessment on ingredients of Household Cleaning Products*. Repéré à https://www.heraproject.com/files/29-E-04_pcm_HHCB_AHTN_HERA_Environmenta_DISCLed26.pdf.
- Herren D. et Berset J. D. (2000). Nitro musks, nitro musk amino metabolites and polycyclic musks in sewage sludges: Quantitative determination by HRGC-ion-trap-MS/MS and mass spectral characterization of the amino metabolites. *Chemosphere*, 40(5), 565-574. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653599003252>.
- Homem V., Alves A., Alves A. et Santos L. (2016). Ultrasound-assisted dispersive liquid-liquid microextraction for the determination of synthetic musk fragrances in aqueous matrices by gas chromatography-mass spectrometry. *Talanta*, 148, 84-93. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003991401530415X>.
- Homem V., José A. S., Ratola N., Santos L. et Alves A. (2015). Prioritisation approach to score and rank synthetic musk compounds for environmental risk assessment. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 90(9), 1619-1630. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jctb.4628>.
- Hu Z., Shi Y. et Cai Y. (2011). Concentrations, distribution, and bioaccumulation of synthetic musks in the Haihe River of China. *Chemosphere*, 84(11), 1630-1635. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653511005388>.
- Hughes J. S. et Krishnaswamin S. K. (1985). *The toxicity of B0817.01 to Sclerotinia sclerotiorum*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Indukern. (2006). Safety data sheet ambrinol. Repéré à <http://www.indukern-ffingredients.com/en/products>
- Institut de recherche pour matériaux parfumant (IRMP). (s.d.). À propos RIFM. Repéré à <https://www.rifm.org/about.php>
- Institut national de l'environnement industriel et des risques. (2010). 1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexaméthylindeno[5,6-c]pyranne Repéré à <https://substances.ineris.fr/fr/substance/64>
- Instituts américains de la santé (NIH). (2009). Musk ambrette. Repéré à <https://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search2/r?dbs+hsdb:@term+@na+MUSK%20AMBRETTE>
- International Flavors & Fragrances inc. (IFF). (2018). Iso E Super® Repéré à <http://www.iff.com/smell/online-compendium#iso-e-super>
- International Fragrance Association (IFRA). (2016). IFRA Volume of use survey 2016: Transparency List. Repéré à <http://admin-ifra.alligence.com/Upload/Docs/Transparency%20list.pdf>
- International Fragrance Association (IFRA). (2007). A sense of understanding. Repéré à <http://www.ifraorg.org/>

- Johannes P., Heinz-Jürgen B. et Horst S. (2004). New Woody and Ambery Notes from Cedarwood and Turpentine Oil. *Chemistry & Biodiversity*, 1(12), 1936-1948. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cbdv.200490148>.
- Justicia J., Campaña A. G., Bazdi B., Robles R., Cuerva J. M. et Oltra. J E. (2008). Titanium-Catalyzed Enantioselective Synthesis of α -Ambrinol. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 350(4), 571-576. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adsc.200700511>.
- Kaplan K. (2017). The fragrance of a new Pesticide. *AgResearch Magazine*, 65(6). Repéré à <https://agresearchmag.ars.usda.gov/2017/jun/pesticide/>.
- Kim S., Thiessen P.A., Bolton E.E., Chen J., Fu G., Gindulyte A., ... Bryant S.H. (2016) PubChem substance and compound databases. Repéré à <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- Klaschka U., von der Ohe P. C., Bschorer A., Krezmer S., Sengl M. et Letzel M. (2013). Occurrences and potential risks of 16 fragrances in five German sewage treatment plants and their receiving waters. *Environmental Science and Pollution Research*, 20(4), 2456-2471. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11356-012-1120-9>.
- Klepka S. et Petto R. (1997). *Effects of musk ketone on reproduction of the springtail Folsomia candida in artificial soil*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/e6a84904-118b-447a-8766-f7bda48f7ce0>.
- Kuhlmann. (2005). *Long-term bioconcentration and bioaccumulation of musk xylene and bromocyclen in rainbow trouts*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Leffingwell et al. (2012). Flavors and Fragrances industry leaders. Repéré à http://www.leffingwell.com/top_10.htm
- Lenochová P., Vohnoutová P., Roberts S.-C., Oberzaucher E., Grammer K. et Havlíček J. (2012). Psychology of Fragrance Use: Perception of Individual Odor and Perfume Blends Reveals a Mechanism for Idiosyncratic Effects on Fragrance Choice. *PLoS ONE*, 7(3). Repéré à <https://journals.plos.org/plosone/article/file?id=10.1371/journal.pone.0033810&type=printable>.
- Lewinsohn E., Schalechet F., Wilkinson J., Matsui K., Tadmor Y., Nam K.-H., ... Pichersky E. (2001). Enhanced Levels of the Aroma and Flavor Compound S-Linalool by Metabolic Engineering of the Terpenoid Pathway in Tomato Fruits. *Plant Physiology*, 127(3), 1256-1265. Repéré à <http://www.plantphysiol.org/content/plantphysiol/127/3/1256.full.pdf>.
- Lishman L., Smyth S. A., Sarafin K., Kleywegt S., Toito J., Peart T., ... Seto P. (2006). Occurrence and reductions of pharmaceuticals and personal care products and estrogens by municipal wastewater treatment plants in Ontario, Canada. *Science of The Total Environment*, 367(2), 544-558. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969706002518>.
- Llompart M., Celeiro M., Pablo Lamas J., Sanchez-Prado L., Lores M. et Garcia-Jares C. (2013). Analysis of plasticizers and synthetic musks in cosmetic and personal care products by matrix solid-phase dispersion gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1293, 10-19. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021967313005359>.
- Loi des affaires pharmaceutiques japonaise*, 2006.
- Loi sur la qualité de l'environnement*, L.R.Q., c Q-2.
- Loi sur les aliments et drogues*, L.R.C. 1985, c. F-27.
- Lopez B., Ollivier P., Togola A., Baran N. et Ghestem J.-P. (2015). Screening of French groundwater for regulated and emerging contaminants. *Science of The Total Environment*, 518-519, 562-573. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969715001321>.

- Lu Y., Yuan T., Hu J. et Wang W. (2009). *Simultaneous Determination of Trace Polycyclic and Nitro Musks in Water Samples Using Optimized Solid-Phase Extraction by Gas Chromatography and Mass Spectrometry*. Repéré à https://www.jstage.jst.go.jp/article/analsci/25/9/25_9_1125/_pdf/-char/en
- Lyman W. J., Reehl W. F. et Rosenblatt D. H. (1990). Handbook of chemistry property estimation methods. ACS. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0043135496001017>.
- Ministère du Développement durable de l'Environnement de la Faune et des Parcs (MDDEFP). (2013). *Détermination exhaustive des substances utilisées, ou susceptibles de l'être, pour le forage et la fracturation au Québec, et des sous-produits de dégradation et de réaction ; évaluation de leurs propriétés toxicologiques et de leur potentiel de biodégradation, de bioaccumulation, de persistance et de toxicité globale*. Repéré à http://www.bape.gouv.qc.ca/sections/mandats/gaz_de_schiste-enjeux/documents/Etudes_EES/Rapport-etude-E3-5_MDDEFP_CRIQ.pdf.
- Ministère de la Santé du Travail et des Affaires sociales. (2000). *Standard for cosmetics*. Repéré à <https://www.mhlw.go.jp/file/06-Seisakujouhou-11120000-Iyakushokuhinkyoku/0000032704.pdf>.
- Ministère du Développement durable de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques (MDDELCC). (2017). *Contaminants d'intérêt émergent, substances toxiques et état des communautés de poissons dans des cours d'eau de la Montérégie et de l'Estrie*. Repéré à http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/eau/eco_aqua/toxique/monteregie-estrie/contaminant-emergent.pdf.
- Ministère du Développement durable de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques (MDDELCC). (s.d.). *Substances toxiques*. Repéré à <http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/eau/flrivlac/subst-toxiques.htm>.
- Mitsui T. (1997). Cosmetics and fragrances. *New Cosmetic Science* p. 99-120. Repéré à <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444826541500065>
- Müller S., Schmid P. et Schlatter C. (1996). Occurrence of nitro and non-nitro benzenoid musk compounds in human adipose tissue. *Chemosphere*, 33(1), 17-28. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045653596001609>.
- Nakata H., Hinosaka M. et Yanagimoto H. (2015). Macrocyclic-, polycyclic-, and nitro musks in cosmetics, household commodities and indoor dusts collected from Japan: Implications for their human exposure. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 111, 248-255. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0147651314004588>.
- National center for biotechnology Information. (2018). *Pubchem* Repéré à <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- National Industrial Chemicals Notification and Assessment Scheme (NICNAS). (2018). Nitromusks: Environment tier II assessment. Repéré à <https://www.nicnas.gov.au/chemical-information/imap-assessments/imap-assessments/tier-ii-environment-assessments/nitromusks>
- Nouveau dictionnaire d'histoire naturelle, appliquée aux arts, à l'agriculture, à l'économie rurale et domestique, à la médecine, etc. Par une Société de naturalistes et d'agriculteurs: 1: ABA-ANI.* (1870). *Nouveau dictionnaire d'histoire naturelle, appliquée aux arts, à l'agriculture, à l'économie rurale et domestique, à la médecine, etc. Par une Société de naturalistes et d'agriculteurs: 1: ABA-ANI.*
- Olfastory. (2004). Famille olfactive des parfums. Repéré à <http://www.olfastory.com/famille-olfactive.html>

- Opdyke D. L. J. (1975). Monographs on fragrance raw materials: Ethylene brassylate. *Food and Cosmetics Toxicology*, 13(1), 91-92. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0015626475900875>.
- Organisation de coopération et développement économique (OCDE). (2011). Repéré à <https://canadachemicals.oecd.org/ChemicalDetails.aspx?Key=f5413902-2f7e-4012-b6d1-d44998862d2d&Idx=0>.
- Ortiz de García S., Pinto Pinto G., García Encina P. et Irusta Mata R. (2013). Consumption and occurrence of pharmaceutical and personal care products in the aquatic environment in Spain. *Science of The Total Environment*, 444, 451-465. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969712014830>.
- Osemwengie L. I. et Steinberg S. (2001). On-site solid-phase extraction and laboratory analysis of ultra-trace synthetic musks in municipal sewage effluent using gas chromatography–mass spectrometry in the full-scan mode. *Journal of Chromatography A*, 932(1), 107-118. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002196730101216X>.
- Peck A. M. et Hornbuckle K. C. (2004). *Synthetic Musk Fragrances in Lake Michigan*. Repéré à <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/es034769y>
- Peng Y., Fang W., Krauss M., Brack W., Wang Z., Li F. et Zhang X. (2018). Screening hundreds of emerging organic pollutants (EOPs) in surface water from the Yangtze River Delta (YRD): Occurrence, distribution, ecological risk. *Environmental Pollution*, 241, 484-493. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0269749118314088>.
- Perring K. (2016). Perfumes. *Kirk Othmer Encyclopedia of Chemical Technology* p. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/0471238961.1605180619030818.a01.pub3>
- Philip K. et Walter E. (2004). Synthesis and Odor of Aliphatic Musks: Discovery of a New Class of Odorants. *European Journal of Organic Chemistry*, 2004(2), 354-365. Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ejoc.200300578>.
- Pommeruy M., Cormier M., Brunel L. et Breton M. (1987). Étude de la flore bactérienne d'un estuaire breton (Élorn, rade de Brest, France). *Oceanologica acta*, 10(2), 187-196. Repéré à <http://archimer.ifremer.fr/doc/00109/22069/19711.pdf>.
- Rainieri S., Barranco A., Primec M. et Langerholc T. (2017). Occurrence and toxicity of musks and UV filters in the marine environment. *Food and Chemical Toxicology*, 104, 57-68. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0278691516304197>.
- Règlement sur la persistance et la bioaccumulation, DORS/2000-107.*
- Règlement sur les cosmétiques, C.R.C., c. 869.*
- Règlement sur l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), J.O.L. 2007, c. 136.*
- Ribeiro H., Ramos S., Homem V. et Santos L. (2017). Can coastline plant species be used as biosamplers of emerging contaminants? - UV-filters and synthetic musks as case studies. *Chemosphere*, 184, 1134-1140. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653517309888>.
- Ricking M., Schwarzbauer J., Hellou J., Svenson A. et Zitko V. (2003). Polycyclic aromatic musk compounds in sewage treatment plant effluents of Canada and Sweden—first results. *Marine Pollution Bulletin*, 46(4), 410-417. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0025326X02004800>.

- Roger P. (2010). *Les propriétés environnementales des substances*. Repéré à http://www.cneeic.org/content/download/800546/8876304/file/chapitre_0_global_%20Les_proprietes_environnementales_des_substances.pdf.
- Roosens L., Covaci A. et Neels H. (2007). Concentrations of synthetic musk compounds in personal care and sanitation products and human exposure profiles through dermal application. *Chemosphere*, 69(10), 1540-1547. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653507007291>.
- Rowe David J., O'Hare Liam, Grigor John, Zviely Michael, Jameson Simon B., Kraft Philip, . . . J. H. S. (2015). *Book Chemistry and technology of flavors and fragrances*: Repéré à <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9781444305517>
- Royal society of chemistry. (s.d.). (3E)-Oxacyclohexadec-3-en-2-one. Repéré à <http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.10316010.html?rid=28d87fed-e044-4ca1-85f3-76c9064e58d9>
- Rubinfeld S. A. et Luthy R. G. (2008). Nitromusk compounds in San Francisco Bay sediments. *Chemosphere*, 73(6), 873-879. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004565350800948X>.
- Rudio J. (1996). *Partition coefficient n-octanol/water of musk xylene according to OECD: Guideline No. 117*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Salvito D. T., Senna R. J. et Federle T. W. (2002). A framework for prioritizing fragrance materials for aquatic risk assessment. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 21(6), 1301-1308. Repéré à <https://setac.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/etc.5620210627>.
- Sanchez-Prado L., Llompart M., Lamas J. P., Garcia-Jares C. et Lores M. (2011). Multicomponent analytical methodology to control phthalates, synthetic musks, fragrance allergens and preservatives in perfumes. *Talanta*, 85(1), 370-379. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039914011002840>.
- Sangion A. et Gramatica P. (2016). PBT assessment and prioritization of contaminants of emerging concern: Pharmaceuticals. *Environmental Research*, 147, 297-306. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013935116300627>.
- Santé Canada. (2006). L'étiquetage des cosmétiques- directive. Repéré à <https://www.canada.ca/fr/sante-canada/services/securite-produits-consommation/rapports-publications/industrie-professionnels/etiquetage-cosmetiques.html>
- Santé Canada. (2018). Liste des ingrédients dont l'usage est interdit dans les cosmétiques. Repéré à <https://www.canada.ca/fr/sante-canada/services/securite-produits-consommation/cosmetiques/liste-critique-ingredients-cosmetiques-ingredients-interdits-usage-restrict/liste-critique.html>
- Sauvajon L. (2014). Les contaminants d'intérêt émergent: enjeux pour la population, *L'exemplaire*. Repéré à <https://www.exemplaire.com.ulaval.ca/reportages/les-contaminants-dinteret-emergent-enjeux-emergents-pour-la-population/>
- Schramm K. W., Kaune A., Beck B., Thumm W., Behechti A., Kettrup A. et Nickolova P. (1996). Acute toxicities of five nitromusk compounds in Daphnia, algae and photoluminescent bacteria. *Water Research*, 30(10), 2247-2250. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0043135496001017>.
- Seyfried M., Boschung A., Miffon F., Ohleyer E. et Chaintreau A. (2014). Elucidation of the upper pathway of alicyclic musk Romandolide® degradation in OECD screening tests with activated

- sludge. *Environmental Science and Pollution Research*, 21(16), 9487-9494. Repéré à <https://link-springer-com.ezproxy.usherbrooke.ca/content/pdf/10.1007%2Fs11356-013-2347-9.pdf>.
- Simonich S. L., Begley W. M., Debaere G. et Eckhoff W. S. (2000). Trace Analysis of Fragrance Materials in Wastewater and Treated Wastewater. *Environmental Science & Technology*, 34(6), 959-965. Repéré à <https://doi.org/10.1021/es991018g>.
- Sommer C. (2004). The Role of Musk and Musk Compounds in the Fragrance Industry. *Series Anthropogenic Compounds: Synthetic Musk Fragrances in the Environment: The Role of Musk and Musk Compounds in the Fragrance Industry* 1-16). Berlin, Heidelberg:
- Sousa V. et Suprenant D. C. (1984). *Acute toxicity of PI618.02 (musk xylene) to bluegill (Lepomis macrochirus)*. Repéré à <https://echa.europa.eu/documents/10162/501c23fb-0076-4990-8fca-648ed7a1fc6a>.
- Steinemann A. (2016). Fragranced consumer products: exposures and effects from emissions. *Air Quality, Atmosphere & Health*, 9, 861-866. Repéré à <https://link-springer-com.ezproxy.usherbrooke.ca/content/pdf/10.1007%2Fs11869-016-0442-z.pdf>
- Surburg H. et Panten J. (2016). *Book Common fragrance and flavor materials : preparation, properties and uses:* (5th). Repéré à <http://ebookcentral.proquest.com/lib/usherbrookemgh-ebooks/detail.action?docID=4406070>
- Terzić S., Senta I., Ahel M., Gros M., Petrović M., Barcelo D.,... Jabučar D. (2008). Occurrence and fate of emerging wastewater contaminants in Western Balkan Region. *Science of The Total Environment*, 399(1), 66-77. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969708002490>.
- The International Fragrance Association (IFRA). (2010). Index of IFRA standards- 46th amendment. Repéré à http://www.ifraorg.org/en-us/search/s/standards_index_46th_amendment#.W1nFAGfsbAU
- Turcot L. (2016, 9 février). L'hygiène corporelle, de l'Antiquité à aujourd'hui, *Ici Radio-Canada*. Repéré à http://ici.radio-canada.ca/emissions/aujourd_hui_1_histoire/2015-2016/chronique.asp?idChronique=397395
- United States Environmental protection agency (US EPA). (2012). Sustainable futures / P2 framework maunal 2012 EPA-748-B12-001: 7. Estimating persistence, bioaccumulation, and toxicity using the PBT profiler. p. Repéré à <https://www.epa.gov/sites/production/files/2015-05/documents/07.pdf>
- United States Environmental protection agency (US EPA). (2018a). 4,4a,5,9b-Tetrahydroindeno(1,2-d)-1,3-dioxin. Repéré à <https://comptox.epa.gov/dashboard/dsstoxdb/results?utf8=%E2%9C%93&search=18096623>
- United States Environmental protection agency (US EPA). (2018b). *Chemistry Dashboard*. Repéré à <https://comptox.epa.gov/dashboard>
- United States Environmental protection agency (US EPA). (2018c). Ethanone, 1-[4-(1,1-dimethylethyl)-2,6-dimethyl-3, 5-dinitrophenyl]-. Repéré à <https://chemview.epa.gov/chemview>
- United States Food and drug administration (FDA). (2002). *Is it a cosmetic, a drug, or both ?(Or is it soap?)*. Repéré à <https://www.fda.gov/downloads/Cosmetics/GuidanceRegulation/LawsRegulations/UCM488796.pdf>.
- Vallecillos L., Pocurull E. et Borrull F. (2012). Fully automated determination of macrocyclic musk fragrances in wastewater by microextraction by packed sorbents and large volume injection gas

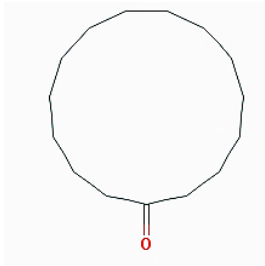
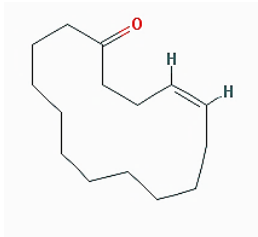
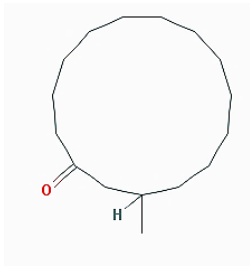
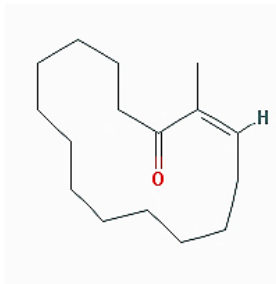
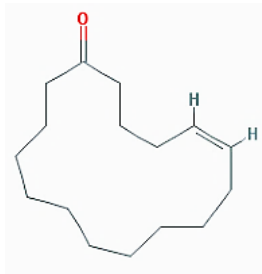
- chromatography–mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1264, 87-94. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021967312014616>.
- Vallecillos L., Pocurull E. et Borrull F. (2013). A simple and automated method to determine macrocyclic musk fragrances in sewage sludge samples by headspace solid-phase microextraction and gas chromatography–mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1314, 38-43. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021967313014623>.
- Van Dijk A. (1997). Acute toxicity of AHTN to *Pseudokirchneriella subcapitata*. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378427499001708>.
- Van Gestel C., Otermann K. et Canton J. H. (1985). Relation between water solubility, octanol/water partition coefficients, and bioconcentration of organic chemicals in fish: A review. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 5(4), 422-431. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0273230085900078>.
- Vecchiato M., Cremonese S., Gregoris E., Barbaro E., Gambaro A. et Barbante C. (2016). Fragrances as new contaminants in the Venice lagoon. *Science of The Total Environment*, 566-567, 1362-1367. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969716311354>.
- Vigon. (2005). Product spécification for Indoflor Repéré à <https://www.vigon.com/product/indoflor-crystals/>
- Vigon. (2015). Anthamber (Iso E Super). Repéré à <https://www.vigon.com/product/anthamber-iso-e-super/>
- Wen L., Moallem I., Paller K. A. et Gottfried J. A. (2007). Subliminal Smells Can Guide Social Preferences. *Psychological Science* (0956-7976), 18(12), 1044-1049. Repéré à <http://ezproxy.usherbrooke.ca/login?url=https://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=bth&AN=27550399&lang=fr&site=eds-live>.
- Whitlock S. E., Pereira M. G., Shore R. F., Lane J. et Arnold K. E. (2018). Environmentally relevant exposure to an antidepressant alters courtship behaviours in a songbird. *Chemosphere*, 211, 17-24. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653518313328>.
- Wollenberger L., Breitholtz M., Ole Kusk K. et Bengtsson B.-E. (2003). Inhibition of larval development of the marine copepod *Acartia tonsa* by four synthetic musk substances. *Science of The Total Environment*, 305(1), 53-64. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969702004710>.
- Yadav J. S., Baishya G. et Dash U. (2007). Synthesis of (+)-ambergetal and its analog from l-abietic acid. *Tetrahedron*, 63(39), 9896-9902. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040402007011167>.
- Yang J.-J. et Metcalfe C. D. (2006). Fate of synthetic musks in a domestic wastewater treatment plant and in an agricultural field amended with biosolids. *Science of The Total Environment*, 363(1), 149-165. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969705004833>.
- Zarzo M. (2013). What is a fresh scent in perfumery ? Perceptual freshness is correlated with substantivity. *Sensors*, 13(1), 463-483. Repéré à <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3574685/>.

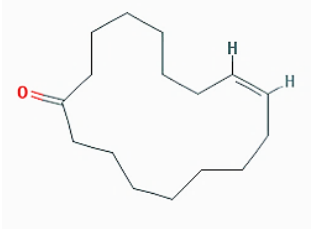
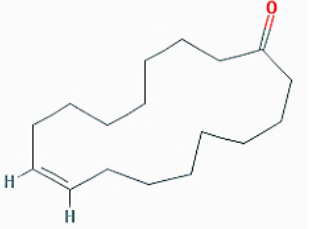
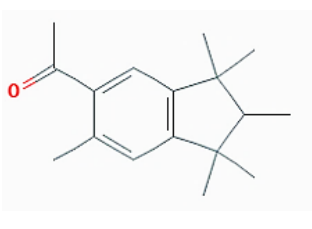
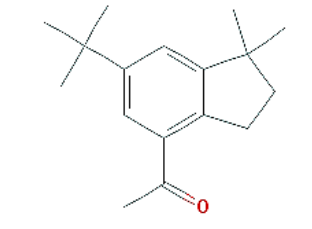
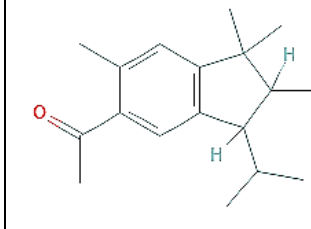
ANNEXE 1- LISTE DES COMPOSÉS IDENTIFIÉS COMME NOTE DE BASE (inspiré de Kim et al., 2016)

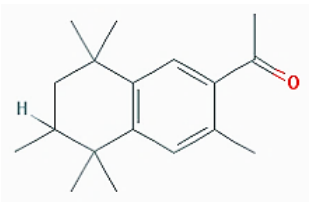
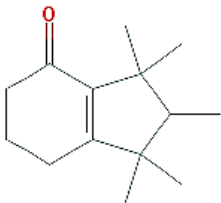
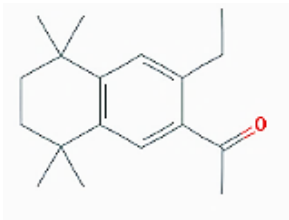
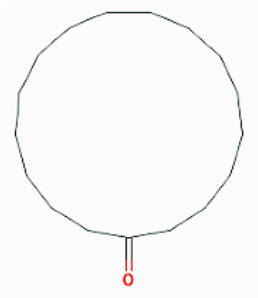
Classe des odeurs	Groupement fonctionnel	CAS	Nom commun
Ambrée	Alcool	70788-30-6	Timbérol
Ambrée	Cétone	54464-57-2	Isocyclemonone E
Ambrée	Éther cyclique	13786-79-3	Cédroxyde
Ambrée	Éther cyclique	154171-76-3	Ambre spiroène
Ambrée	Éther cyclique	57345-19-4	Ambre kéral
Animale	Alcool	41199-19-3	Ambrinol
Animale	Cétone	502-72-7	Cyclopentadécane
Animale	Cétone	14595-54-1	(4Z)-Cyclopentadéc-4-ène-1-one
Animale	Cétone	541-91-3	3-Méthylcyclopentadécane-1-one
Animale	Cétone	82356-51-2	Méthylcyclopentadéc-2-ène-1-one
Animale	Cétone	37609-25-9	5-Cyclohexadécène-1-one
Animale	Cétone	3100-36-5	Cyclohexadéc-8-ène-1-one
Animale	Cétone	542-46-1	Civetone
Animale	Cétone	15323-35-0	Phantolide
Animale	Cétone	13171-00-1	4-Acétyle-6-tert-butyle-1,1-diméthylindane
Animale	Cétone	68140-48-7	Traséolide
Animale	Cétone	1506-02-1	1-(5,6,7,8-Tétrahydro-3,5,5,6,8,8-hexaméthyl-2-naphthyl)éthane-1-one
Animale	Éther cyclique	1222-05-5	Galoxalide
Animale	Éther cyclique	29895-73-6	glycérylacétale de phénylacétaldéhyde
Animale	Éther cyclique	18096-62-3	Indolétal
Animale	Ester	141773-73-1	Helvetolide
Animale	Ester	236391-76-7	Romandolide
Animale	Ion ammonium	81-14-1	Musc cétone
Animale	Ion ammonium	81-15-2	Musc xylène
Animale	Ion ammonium	83-66-9	Musc ambrette
Animale	Ion ammonium	116-66-5	Moscène
Animale	Ion ammonium	145-39-1	Musc tibétène
Animale	Lactone	6707-60-4	Cervolide
Animale	Lactone	54982-83-1	Zénolide
Animale	Lactone	123-69-3	Ambrettolide
Animale	Lactone	105-95-3	Éthylène Brassylate

Classe des odeurs	Groupe fonctionnel	CAS	Nom commun
Animale	Lactone	106-02-5	Exaltolide
Animale	Lactone	34902-57-3	Globalide
Balsamique	Phénol	94-86-0	2-Éthoxy-5-(1-propényl)phénol
Balsamique	Phénolcarboxylate	65406-77-8	(Z)-3-hexène-1-yl salicylate
Ligneuse	Alcool	87118-95-4	3,4,5,6,6-Pentaméthylheptan-2-ol
Ligneuse	Alcool	41890-92-0	7-Méthoxy-3,7-diméthylheptan-2-ol
Ligneuse	Alcool	72089-08-8	β,2,2,3-Tétraméthylcyclopent-3-ène-1-butanol
Ligneuse	Alcool	28219-60-5	Sandélic
Ligneuse	Alcool	65113-99-7	Santalol
Ligneuse	Alcool	28219-61-6	Balinol
Ligneuse	Alcool	198404-98-7	1-méthyl-2-((1,2,2-triméthylbicyclo(3.1.0)hex-3-yl)méthyl)- Cyclopropaneméthanol
Ligneuse	Alcool	4105-12-8	3-trans-Isocamphylcyclohexanol
Ligneuse	Cétone	32388-55-9	Acétyle de cédre
Ligneuse	Éther	19870-74-7	8-Méthoxycédre
Ligneuse	Éther	5867-11-6	Bahamaolide A
Ligneuse	Ester	58985-18-5	Acétate de p-menthan-8-yle
Ligneuse	Ester	35836-72-7	Acétate de (-)-nopyle
Ligneuse	Ester	36386-52-4	Acétate de bornyle
Ligneuse	Ester	125-12-2	Acétate d'isobornyle
Ligneuse	Ester	32210-23-4	Acétate de 4-Tert-butylcyclohexyle
Ligneuse	Ester	2500-83-6	Acétate de Tricyclo[5.2.1.0 ^{2,6}]déc-4-ène-8-yle
Ligneuse	Ester	57934-97-1	Givescone
Ligneuse	Lactone	91-64-5	Coumarin
Poudreuse	Composé divers	51115-67-4	Méthyl diisopropylpropioamine
Terreuse	Alcool	589-98-0	3-Octanol
Terreuse	Alcool	3391-86-4	1-Octène-3-ol;
Terreuse	Cétone	23787-90-8	Isolongifanone
Terreuse	Phénolcarboxylate	4707-47-5	Méthyl 3-méthylorsellinate

ANNEXE 2- FRAGRANCES DE TYPE ANIMAL DONT LE GROUPEMENT FONCTIONNEL EST UNE CÉTONE (inspiré de Kim et al., 2016)

Nom commun				
Exaltone Cyclopentadécane MUSK 15 (CAS 502-72-7)	Exaltenone Cis-4-cyclopentadécène-1-one 4-cyclopentadécène-1-one, (4Z)- (CAS 14595-54-1)	Muscone 3-méthyl-1-cyclopentadécane 3-méthylcyclopentadécane-1-one (CAS 541-91-3)	Muscenone Méthylcyclopentadécène 3-méthylcyclopentadécène (CAS 82356-51-2)	Ambretone 5-cyclohexadécène-1-one (CAS 37609-25-9)
				

Nom commun				
Globanone 8-cyclohexadécaneone	Civetone (Z)-9-cycloheptadécène-1-one Zibéton	Phantolide 6-Acétyle-1,1,2,3,3,5-hexaméthylindan	Celestolide 1-[6-(1,1-diméthyléthyl)-2,3-dihydro-1,1-diméthyl-1H-inden-4-yl]-éthanone	Traseolide 5-acétyle-3-isopropyl-1,1,2,6-tetraméthylindane
(CAS 3100-36-5)	(CAS 542-46-1)	(CAS 15323-35-0)	(CAS 13171-00-1)	(CAS 68140-48-7)
				

Nom commun			
Fixolide 6-acétyl-1,1,2,4,4,7-hexaméthyltetraline (AHTN)	Cashmeran 1,2,3,5,6,7-hexahydro-1,1,2,3,3-pentaméthyl-4H-inden-4-one	Versalide 7-acétyl-6-éthyl-1,2,3,4-tétrahydro-1,1,4,4-tétraméthyl-naphthalène	Cycloheptadécane Dihydrociveton
(CAS 1506-02-1)	(CAS 33704-61-9)	(CAS 88-29-9)	(CAS 3661-77-6)
			

ANNEXE 3- DONNÉES PHYSICO-CHIMIQUES ET ENVIRONNEMENTALES POUR LES FRAGRANCES

Tableau A.1 Compilation des propriétés physico-chimiques des substances ayant une odeur ambrée (inspiré de l'US EPA)

Nom du composé	Groupement fonctionnel	CAS	Masse molaire (g/mol)	Densité (g/cm ³)	T° congélation (°C)	T° évaporation (°C)	Pression de vapeur (mm Hg)	Solubilité
Timbéröl	Alcool	70788-30-6	226,404	0,854	27,7	284	0,0094	0,0000857
Isocyclemonone E	Cétone	54464-57-2	234,383	0,952	49,2	294	0,00141	0,00016
Cédroxyde	Éther cyclique	13786-79-3	220,356	0,926	14,8	280	0,00584	0,000431
Ambre spirölène	Éther cyclique	154171-76-3	264,409	1,02	70,5	290	0,00407	0,0000785
Ambre kétal	Éther cyclique	57345-19-4	278,436	1,03	116	311	0,00058	0,000052

Tableau A.2 Compilation des propriétés physico-chimiques des substances ayant une odeur ambrée (inspiré de l'US EPA)

Nom du composé	Groupe ment fonctionnel	CAS	Masse molaire (g/mol)	Densité (g/cm ³)	T° congélation (°C)	T° évaporation (°C)	Pression de vapeur (mm Hg)	Solubilité
Ambrinol	Alcool	41199-19-3	194,318	0,968	71,4	266	0,00731	0,00223
Galaxolide	Éther cyclique	1222-05-5	258,405	0,955	36,6	322	0,000276	0,00000569
Glycérylacétate de phénylacétaldéhyde	Éther cyclique	29895-73-6	194,23	1,16	64,1	297	0,00017300	0,38700000
Indolétal	Éther cyclique	18096-62-3	176,215	1,16	64,1	267	0,00434000	0,00742000
Helvetolide	Ester	141773-73-1	284,44	0,913	27,1	310	0,00007890	0,00008520
Romandolide	Ester	236391-76-7	270,369	1	-9,98	307	0,00031700	0,00042500
Musc cétone	Ion ammonium	81-14-1	294,307	1,23	132	371	0,00000572	0,00046700
Musc xylène	Ion ammonium	81-15-2	297,267	1,34	110	NAP	0,00001250	0,00000520
Musc ambrette	Ion ammonium	83-66-9	268,269	1,24	85,3	350	0,00004020	0,00003960
Moscène	Ion ammonium	116-66-5	278,127	1,22	133	348	0,00003570	0,00002580
Musc tibetène	Ion ammonium	145-39-1	266,297	1,19	124	361	0,00001190	0,00000785

Tableau A.2 Compilation des propriétés physico-chimiques des substances ayant une odeur ambrée (Suite) (inspiré de l'US EPA)

nom du composé	Groupe ment fonctionnel	CAS	Masse molaire (g/mol)	Densité (g/cm ³)	T° congélation (°C)	T° évaporation (°C)	Pression de vapeur (mm Hg)	Solubilité
12-Oxahexadécanolide	Lactone	6707-60-4	256,386	0,931	31,5	358	0,00000000	0,00026100
Éthylène dodécanedioate	Lactone	54982-83-1	256,342	1,01	18	378	0,00001380	0,00328000
(8Z)-Oxacycloheptadéc-8-èn-2-one	Lactone	123-69-3	252,398	NAP	23,5	352	0,00000203	0,00002780
Éthylène Brassylate	Lactone	105-95-3	270,369	0,991	45,5	382	0,00000820	0,00272000
Pentadécalactone	Lactone	106-02-5	240,387	0,904	33,7	341	0,00012000	0,00030000
(3E)-1-Oxacyclohexadéc-3-èn-2-one	Lactone	34902-57-3	238,365	0,96	-20	331	0,00120000	0,00000404